

# 四川师范大学本科毕业论文

## 基于 Mathematica 程序对谷电子能带结构的模拟研究

学生姓名	陈福星
------	-----

院系名称	物理与电子工程学院
------	-----------

专业名称	物理学
------	-----

班 级	2018 级 1 班
-----	------------

学 号	2018070102
-----	------------

指导教师	程才
------	----

完成时间	2022 年 5 月 20 日
------	-----------------

# 基于 Mathematica 程序对谷电子能带结构的模拟研究

物理学专业

学生姓名 陈福星 指导教师 程才

**摘要：**电子在晶格周期性势场影响下的运动遵循布洛赫定理。布洛赫电子除了具有电荷和自旋两个内禀自由度外，还有其他内禀自由度。谷电子学是近几年除了传统电子学和自旋电子学之外的研究能带极值的新型电子学。电子“能谷”被发现并被用来研究和发展新型电子学器件。它在微观领域可以用于编码、处理和存储信息，相较于传统电子学或自旋电子学更具有趣味性和深度。

本文是基于 Mathematica 程序从石墨烯的两带紧束缚模型出发细致推导和详细研究能谷。石墨烯能带结构中存在线性色散的 Dirac 点，我们把两带模型分别在 K 处和 K' 点做泰勒展开，则可得到能谷特性，即谷指数  $\tau$ 。进一步考虑自旋轨道耦合（SOC）和空间反演对称破缺导致的交错晶格势的共同作用，打破谷的空间反演对称性，进而 K 和 K' 退简并，能量不一样，便产生了谷劈裂（数 10 mV 量级的带隙）。

单层二硫化钼也可以通过近邻诱导的磁相互作用产生巨大的能谷劈裂。把哈密顿量在 K 和 K' 附近做线性展开并对其进行修正，分析对比 K 点和 K' 点谷劈裂的现象，为后人后续研究提供有利的参考价值。

**关键词：**石墨烯 单层 MoS<sub>2</sub> 能带结构 谷电子学 Mathematica

# Simulation of Valley electron band structure based on Mathematica program

Major Physics

**Undergraduate:** Fu-Xin Chen    **Supervisor:** Cai Cheng

**ABSTRACT:** Under the periodic potential of solid, the movement of an electron obeys the Bloch theorem. In addition to the charge and real spin degree of freedom, Bloch electrons in solids are endowed with valley degree of freedom representing the local energy extrema of the Bloch energy bands. Valleytronics is a new type of electronics that has studied energy band extrema in addition to traditional electronics and spintronics in recent years. Electronic "energy valleys" are discovered and used to research and develop new electronic devices. It can be used to encode, process and store information in the microscopic field, which is more interesting and deeper than traditional electronics or spintronics.

In this paper, based on the Mathematica program, starting from the two band with tight-binding model of graphene, the energy valley is deduced and studied in detail. There is a Dirac point of linear dispersion in the graphene energy band structure. We can perform Taylor expansion of the two-band tight-binding model at the K point and the K' point, respectively, to obtain the energy valley feature, that is, the valley index  $\tau$ . Further considering the joint action of spin-orbit coupling (SOC) and the staggered lattice potential caused by the space inversion symmetry breaking, the space inversion symmetry of the valley is broken, and then K and K' degenerate, and the energy is different, resulting in Valley splitting (bandgap on the order of 10 mV).

Similarly, monolayer molybdenum disulfide can also produce huge energy valley splitting through nearest neighbor induced magnetic interaction. The Hamiltonian is linearly expanded and corrected near K and K', and the phenomenon of valley splitting at point K and point K' is analyzed and compared, which provides a favorable reference value for future research.

**Keywords:** Graphene    monolayer MoS<sub>2</sub>    Band structure    Valley electronic Mathematica

# 目 录

摘要.....	I
ABSTRACT.....	II
1 谷电子相关概念、能带结构及研究综述 .....	1
1.1 谷电子学的相关概念 .....	1
1.2 石墨烯，单层二硫化钼的能带结构 .....	1
1.3 谷电子能带结构之前的研究综述 .....	2
2 固体物理中的紧束缚模型 .....	4
3 石墨烯能谷结构的推导.....	9
3.1 石墨烯能带结构的紧束缚模型 .....	9
3.2 石墨烯能带结构在 K 处泰勒展开 .....	11
3.3 谷指数 $\tau$ .....	13
4 Mathematica 程序对谷电子能带结构建立与分析.....	14
4.1 Mathematica graphene .....	14
4.2 Mathematica MoS <sub>2</sub> .....	14
5 总结与展望.....	17
参考文献.....	18
附录.....	19
致谢.....	24

# 基于 Mathematica 程序对谷电子能带结构的模拟研究

## 1 谷电子相关概念、能带结构及研究综述

### 1.1 谷电子学的相关概念

大数据时代已经到来，普通的半导体器件已经无法满足人类对性能更加优越的电子器件的需求了。在此背景下，寻找新型电子自由度、发展新型电子器件成为重要的研究方向之一。电子除了电荷和自旋自由度外，还有其它的自由度，比如在固体材料能带结构中的谷自由度(valley degree of freedom)。所谓的谷即固体材料中能带结构的极值点。目前，对谷自由度的研究渐渐成为一门学科，即谷电子学。通常人们提到谷就会联想到自然界中的山谷（如图 1.1）。山谷向高处凸起，向低处凹进去，这与本论文中谷劈裂的现象很自然对应起来了。在夜晚的时候，人不管处于山谷的何处，唯一不变的是往上看天空中满天的星辰。

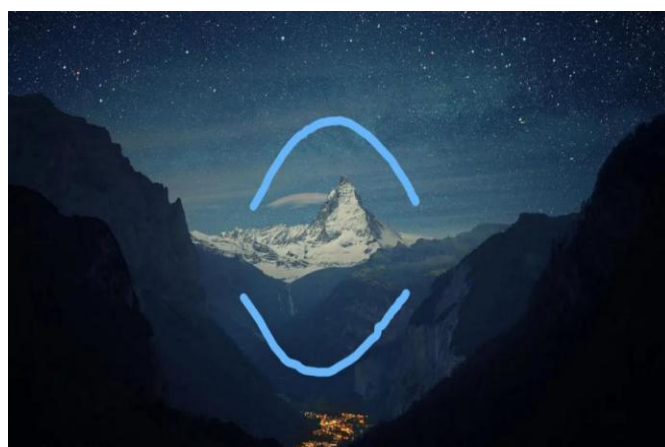


图 1.1 夜晚满天星辰和山谷

### 1.2 石墨烯，单层二硫化钼的能带结构

在能带论里面，能带指的是单电子在周期势场下的能级。石墨烯是二维蜂窝形状的半金属，晶格结构非常稳定，能带结构中有一对狄拉克锥，每套晶格由高对称的六方晶格子组成。同时石墨烯的六方晶格有两种不同的子晶格结构 A 和 B，A 和 B 的能带结构中价带和导带的极值点称之为谷。石墨烯结构基元是两个相邻 C 原子，两个最近相邻 C 原子之间的间距为  $d$ ，相应的倒格子也是六方的，只是取向转动了  $90^\circ$ 。经研究发现，二硫化钼体的层状结构与石墨非常相似，也是作为典型的过渡金属层状二维半导体研究谷电子学非常理想的平台，单层二硫化钼是由堆叠的六角形 S-Mo-S 组成，而“单层”二硫化钼实际上有三层原子：

两层硫原子以上下遮挡的堆垛形式叠加，每个钼原子位于由六个硫原子组成的三棱柱中心。它与石墨烯相反的是，存在直接带隙，所以其能带布局优于石墨烯，进而解决了谷自旋的稳定性问题，从而在电磁学和新型电子学器件等科学技术领域都有更好的应用价值。我们现将它们的能带结构图分别展示如下。

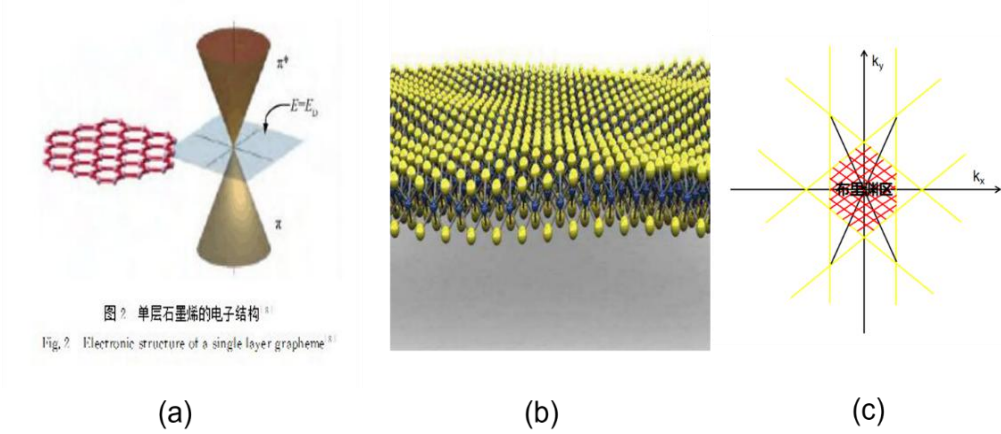


图 1.2 (a) 石墨烯的电子结构 (b) 单层二硫化钼结构图 (c) 石墨烯布里渊区

第一布里渊区又称为简约布里渊区（简称 BZ），它是倒格子动量空间 Wigner-Seitz 原胞（如图所示）。这类结构导致石墨烯具有独特的电子能带结构<sup>[1]</sup>。石墨烯的第一布里渊区的六个顶点为费米点（也称 Dirac 点或 K 点，如下图所示），因为其导带和价带关于狄拉克点对称，所以石墨烯晶格的旋转对称性同样体现在了布里渊区（见下图）。它在 Dirac 点附近有独特的谷选择定则，便于研究谷极化电子态的产生、控制和探测。单层二硫化钼能带在六边形布里渊区顶点附近拥有“谷”状结构，相邻顶点的谷不等价<sup>[2]</sup>。

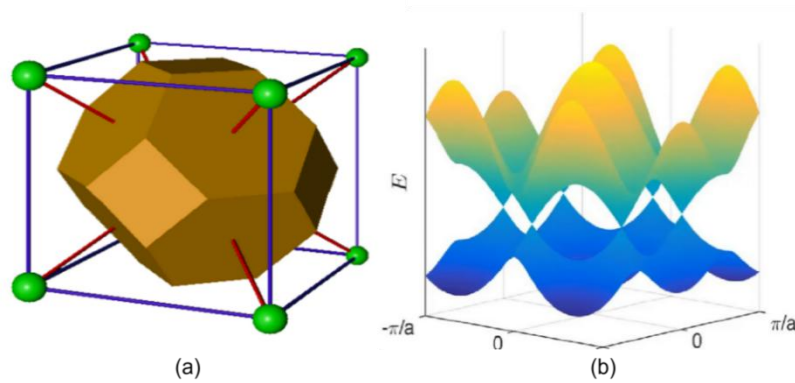


图 1.3 (a) (b) 均为布里渊区图

### 1.3 谷电子能带结构之前的研究综述

#### (1).国外研究现状分析

美国西北大学物理与天文系王鼎盛团队（1993）提出了磁晶各向异性第一性用状态跟踪法进行测量，证明了以单分子为例的二阶效应占主导地位时，MCA 能量可能与它的电子结构有很好的关系，进一步完善了第一性原理理论方法<sup>[3]</sup>。加州大学材料系 H. Peelaers and C. G. Van de Walle（2012）提出应变对 MoS<sub>2</sub> 能带结构和有效质量的影响，并展开相关研究<sup>[4]</sup>。

## (2).国内研究现状分析

山东大学物理学院晶体材料国家重点实验室（2021）对二维有机金属晶格的自发谷极化进行了研究，主要针对二维铁谷材料所稀少涉及的面外磁化展开，极大的提升了铁谷物理科学的影响力<sup>[5]</sup>。山东大学物理学院晶体材料国家重点实验室（2021）进一步展开了二维反磁晶格中的单谷态进行了研究，揭示了磁矩和强自旋轨道耦合的定义，预测了 BiFeO<sub>3</sub> 的单谷态，并给谷极化现象提供了有前景的重要途径<sup>[6]</sup>。

尽管谷电子学研究是凝聚态物理研究的主流化方向，很多物理工作者都进行了相关领域的研究，但它所涉及的内容非常多，仍然有很多细节可以切入。

## 2 固体物理中的紧束缚模型

固体物理中，紧束缚模型是材料中常用的方法，它的存在具有不可替代的价值，下面将对紧束缚模型的基本原理进行详细的展开。单电子近似作为紧束缚方法最初的出发点，其晶体中电子所满足薛定谔方程为

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E \varphi(\vec{r}) \quad (2.1)$$

其中晶体的特点体现在有效的单电子势  $V(\vec{r})$ 。因为晶体的势场是周期的，所以有效的势场  $V(\vec{r} + \vec{R}_1) = V(\vec{r})$  也是周期的。晶格的周期性主要体现在平移一个正格矢  $\vec{R}_1$ ，势能是保持不变（平移不变性）。晶体结构信息包含在有效势  $V(\vec{r})$  中。因为有效势  $V(\vec{r})$  和晶体具有相同的平移对称性，所以我们可以引入一个平移操作算符  $T(\vec{R}_1)$ ，这个平移操作算符  $T(\vec{R}_1)f(\vec{r}) = f(\vec{r} + \vec{R}_1)$  相当于平移  $\vec{R}_1$ ，从而我们可以证明平移的操作算符和晶体当中单电子的哈密顿量是对易的。因此它们有共同的本征态，换句话说就是晶体中电子的波函数是平移操作算符和单电子哈密顿量共同的本征值  $[\hat{T}(\vec{R}_1), \hat{H}] = 0$ 。

它的本征值，体现在引入一个新的量就是波矢  $\vec{k}$ ，而与之对应的就是布洛赫定理

$$T(\vec{R}_1)\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\vec{R}_1}\Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (2.2)$$

这个时候我们描述晶体状态时，不再视为孤立的原子，可以采用主量子数、轨道量子数等。我们之前引入的新的表征本征态的量子数波矢的定义为

$$\vec{k} = \frac{l_1}{N_1}\vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2}\vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3}\vec{b}_3 \quad (2.3)$$

其中  $N_1, N_2, N_3$  是沿着晶体三个基矢方向的元胞数目，总的元胞数目就是  $N_1 \times N_2 \times N_3$ 。对于实际研究的晶体而言， $N_1, N_2, N_3$  都是非常大的量，因此这个波矢（定义上）是准连续的。

因为所要求的晶体中电子的波函数要满足 Bloch 定理

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \varphi(\vec{r}) = E(\vec{k})\varphi(\vec{r}) \quad (2.4)$$

常用方法是把晶体电子的波函数表示为平面波  $\vec{R}_1 = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2 + l_3\vec{a}_3$ （正格矢） $\vec{k}_h = h_1\vec{b}_1 + h_2\vec{b}_2 + h_3\vec{b}_3$ （倒格矢）的线性组合，从而平面波的特点自然满足 Bloch 定理

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}_h} a_{\vec{k} + \vec{k}_h} \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}_h)\vec{r}} \quad (2.5)$$

同时可以看出平面波基函数

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} e^{i(\vec{k} + \vec{k}_h)\vec{r}} \right\} \quad (2.6)$$



本身是不同波函数正交完备的集合，包含的波数越多，意味着它的波矢量越大，能量越高，计算越方便准确。但是平面波仍存在不足，它的模平方等于1，在空间分布处处相等，所以它是完全非定域的。当我们用非定域的集合去描述定域状态，需要一个大的平面波做波包才可以，就会导致计算量自然就非常大。

还有一种方法，把晶体中电子波函数表示成原子轨道线性组合，原子轨道本身是定域的，它的中心在原子附近。

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{R_l}^N a_l \phi^{at}(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (2.7)$$

原子轨道线性组合体现了紧束缚思想（晶体中各原子束缚能力较强），当固体中电子态与组成该固体的自由原子态差别不大时，用原子轨道线性组合就非常方便。我们可以把晶体中的电子波函数表示成为孤立原子轨道的线性组合，那么如何通过原子组合保证波函数满足 Bloch 定理？晶体不同于分子只有能级，它有能带，且由于平移对称性的限制，求出来的电子波函数必须满足 Bloch 定理。



图 2.1 单轨道

这个时候我们只考虑最简单的情况（单轨道问题）：每个原胞（N 个元胞）中只有一个原子轨道，将其线性组合，必须满足 Bloch 定理

$$\psi_k(\vec{r}) = \sum_{R_l}^N a_l \phi^{at}(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (2.8)$$

我们还可以将其写成  $\psi_k(\vec{r} + \vec{R}_l) = e^{i\vec{k}\vec{R}_l} \psi_k(\vec{r})$  的形式，自然求出来组合系数为

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\vec{k}\vec{R}_l} \quad (2.9)$$

它也是满足 Bloch 定理的。那么将其与原子轨道组合得到了波函数形式（Bloch 函数）

$$\psi_k(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{R_l}^N e^{i\vec{k}\vec{R}_l} \phi^{at}(\vec{r} - \vec{R}_l) \quad (2.10)$$

原子轨道这种求和方式还有一个名称为 Bloch 和：原子轨道的组合系数乘以  $e^{i\vec{k}\vec{R}_l}$  这样的相位因子，而这种组合出来的波函数就是晶体当中电子的波函数。

有了这样的波函数，就可以把电子的能量求出来了。我们用这个波函数根据一个哈密顿量做这样一个期望值，就可以求出能量随波矢的一个分布，就是能带（本征态）

$$E(\vec{k}) = \int \psi_k(\vec{r}) \hat{H} \psi_k(\vec{r}) d\vec{r} = E_s - C_s - \sum_{R_s} J_s e^{i\vec{k}\vec{R}_s} \quad (\text{一般公式}) \quad (2.11)$$

牵扯到积分项  $J_s = \int \phi^{at*} [v(\vec{r}) - v^{at}(\vec{r} - \vec{R}_s)] \phi^{at}(\vec{r} - \vec{R}_s) d\vec{r}$ ，反应了晶体中电子有效的势场和孤立原子电子有效的势场之差。

若每个原胞中包含多个原子轨道（常见的形式），有可能是一个原胞中包含多个原子（复式格子），也有可能是一个原胞中只有一个原子，但要考虑多个原子轨道的情况。首先我们应该对每个子晶格（ $\alpha$ ）每一种原子轨道（ $\beta$ ）做 Bloch 和，形成  $\alpha \times \beta$  个 Bloch 函数

$$\varphi_{\alpha,\beta,\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{R}_l} e^{i\vec{k}(\vec{R}_l - \vec{r}_\alpha)} \phi_{\alpha\beta}^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{R}_l - \vec{r}_\alpha) \quad (2.12)$$

$\vec{R}_l$  是第  $l$  个原胞的位矢， $\vec{r}_\alpha$  是原胞中  $\alpha$  原子的位矢。然后我们将 Bloch 函数重新编号，就构成集合  $\{\varphi_{jk}(\vec{r})\}$ 。用这种集函数展开电子的波函数，就得到一个组合系数

$$\varphi_k(\vec{r}) = \sum_j \alpha_j \varphi_{jk}(\vec{r}) \quad (2.13)$$

这个组合系数怎么求呢？我们可以把晶体中电子波函数表示为上述集函数线性组合，代入到薛定谔方程变成代数方程。

对于组合系数齐次方

$$\sum_j a_j (H_{jj} - E(\vec{k}) S_{jj}) = 0 \quad (2.14)$$

哈密顿量的矩阵元

$$H_{jj} = \langle \varphi_{j\vec{k}} | \hat{H} | \varphi_{j\vec{k}} \rangle \quad (\text{哈密顿矩阵})$$

$$S_{jj} = \langle \varphi_{j\vec{k}} | \varphi_{j\vec{k}} \rangle \quad (\text{交叠积分矩阵}) \quad (2.15)$$

就会得到齐次方程组，齐次方程组有非零解的前提就是它的系数行列式便是 0 (线性代数知识)，这样就会变成一个本征值问题。最后就会得到一个久期方程

$$\det[H_{jj} - E(\vec{k}) S_{jj}] = 0 \quad (2.16)$$

解方程就能得到它的一个能带关系（分布）。为了计算这样的矩阵，我们要知道 Bloch 函数下的哈密顿矩阵，而计算哈密顿矩阵会面临很多困难。

$$H_{jj} = \langle \varphi_{j\vec{k}} | -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) | \varphi_{j\vec{k}} \rangle \quad (2.17)$$

我们把晶体中的势场近似表示为原子势场的线性叠加

$$V(\vec{r}) = \sum_{l,\alpha} V_\alpha^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{R}_l - \vec{r}_\alpha) \quad (2.18)$$

其中多中心积分问题有可能遇到两中心积分，也可能遇到三中心积分（计算较麻烦），公式分别如下所示

$$\begin{aligned} & \langle \phi_j^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) | V_\alpha^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) | \phi_j^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) \rangle \\ & \langle \phi_j^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_\alpha) | V_r^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_r) | \phi_j^{\text{at}}(\vec{r} - \vec{r}_\beta) \rangle \end{aligned} \quad (2.19)$$

在此，紧束缚方法不再做过多纠缠，它有一套简单易行的参量化方法，就是把哈密顿矩阵根据原子轨道不同进行分类，它的原子轨道波函数为 $\phi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(\vec{r})Y_{lm}(\theta, \varphi)$ ，S 态时各向同性，P 态时各向异性（ $m=-l, -l+1, \dots, l-1, l$ ）。

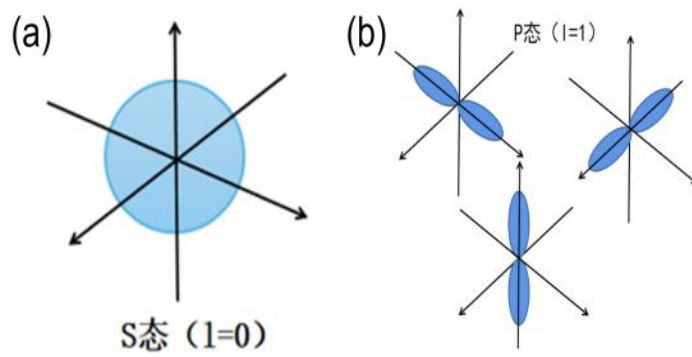


图 2.2 参量化方法和原子轨道相互作用模型（S 态和 P 态）

现在我们可以以 S 轨道和 P 轨道为例，做参量化的方法。第一种情况：原子轨道都是 s，中轴线都在一条直线上，以 $\sigma$ 形式交叠在一起（头对头） $V_{ss\sigma}$ ，一个原子轨道是 s，另一个原子轨道是 p，这种排列方式就是 $V_{sp\sigma}$ ，p 轨道主轴的方向刚好与它在同一条直线上。第二种情况：两个都是 p 轨道，假设两个原子在一条线上，这种积分形式就称为 $V_{pp\sigma}$ （头对头），还有一种两个都是平行的（ $P_y$ 或 $P_z$ 肩并肩），它们的 x 轴是在一条线上，就称为 $V_{pp\pi}$ 。

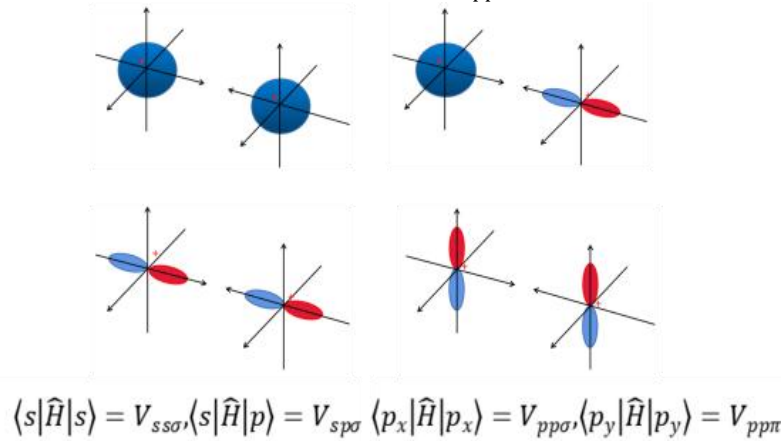


图 2.3 (a) S 态 (b) P 态

更为一般的情况就是两个原子轨道的主轴不在一条线上，它们中心的连线存在这样的夹角，和 y 轴的夹角是 $\beta$ ，和 x 轴的夹角是 $\alpha$ ，和 z 轴的夹角是 $\gamma$ 。它们之间的交叠既有 $\sigma$ 的成分，也有 $\pi$ 的成分，因此整体来看应该是混合的情况。根据它们空间位置的不同把这一项的参量化写成和空间夹角相关的一个关系。我们就把它参量化为 $V_{pp\pi}, V_{pp\sigma}, V_{sp\sigma}, V_{ss\sigma}$ 这四个参量（复杂化简），就可以在位矢是任意空间的时候，计算出重叠的地方。我们可以把这四个参量结果和实验相对比，避开

了处理中多重性积分的问题。上面介绍都是关于 **s** 和 **p** 轨道，其他的轨道(比如：**s** 轨道和 **d** 轨道，**p** 轨道和 **d** 轨道)间参量化也可以在资料上查到。

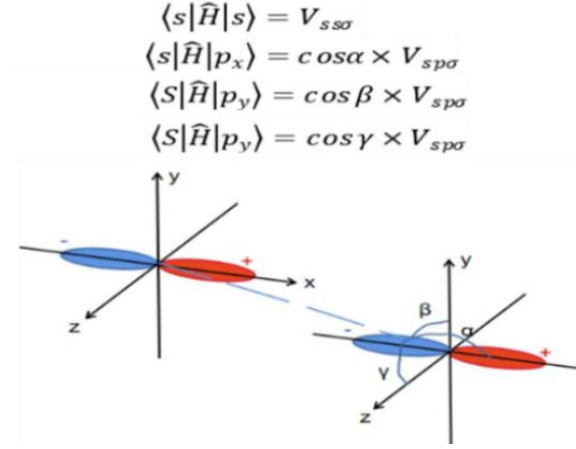


图 2.4 参量化方法和原子轨道相互作用模型（两个原子轨道的主轴不在一条线上）

概括起来，我们可以把紧束缚的方法的基本原理来看成是这个样子的，我们构造哈密顿量可以这样来构造，两个原子轨道有一个重叠跃迁的积分（**m** 和 **n** 原子轨道之间）。

它本身是原子轨道空间位置的函数，同时我们再乘上一个空间位置相关的相位。元胞中第 **n** 个原子轨道和第 **m** 个原子轨道，它们之间的空间位置距离是  $\vec{\tau}_{mn}$ 。

**m** 和相邻元胞中的 **n** 也有一个距离，加上一个  $\vec{R}_l$ ，求和出来得到就是这样的形式

$$H_{mn}(\vec{k}) = \sum_{\vec{R}_l} t_{mn}(\vec{R}_l + \vec{\tau}_{mn}) e^{i[\vec{k} \cdot (\vec{R}_l + \vec{\tau}_{mn})]} \quad (2.20)$$

我们构造哈密顿量之后就可以获得一个哈密顿矩阵，将哈密顿矩阵对角化之后，就得到一个能量的本征值，与本征值相对应的就是本征矢（特例：下面红色标记的地方相对应）[7-8]。

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1 & \cdots & H_{mn} \\ \vdots & \varepsilon_2 & \vdots \\ H_{nm}^* & \cdots & \varepsilon_N \end{pmatrix} \xrightarrow{C^{-1}HC} \begin{pmatrix} E_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & E_2 & \vdots \\ 0 & \cdots & E_N \end{pmatrix}$$

图 2.5 紧束缚的方法的基本原理所对应的哈密顿量

### 3 石墨烯能谷结构的推导过程

#### 3.1 石墨烯能带结构的紧束缚模型

对紧束缚模型概念有初步了解后,我们将具体展示固体物理中的紧束缚近似方法在石墨烯能带结构的研究应用过程,整个推导过程将基于石墨烯的两带结构介绍谷及谷劈裂的现象,下图是一个原胞

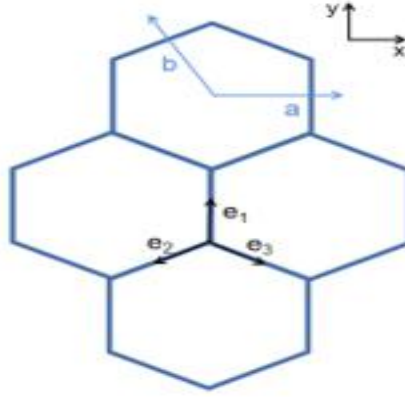


图 3.1 原胞结构示意图

我们选择建立一个直角坐标系(x-y), 其中基矢 $\vec{a}$ 和基矢 $\vec{b}$ 的夹角为  $120^\circ$  , 除此之外还有一个正空间, 基矢 $\vec{a}$ 对应的向量  $a_1$ , 基矢 $\vec{b}$ 对应向量  $a_2$ ,  $a_3$  垂直于桌面向外。由固体物理可知, 倒空间是由一组倒格矢 $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ 组成, 向量  $b_1, b_2, b_3$  与线性无关的向量  $a_1, a_2, a_3$  的关系可以表示为

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi(\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)}{V} \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi(\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)}{V} \quad \vec{b}_3 = \frac{2\pi(\vec{a}_1 \times \vec{a}_2)}{V} \quad V = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (3.1)$$

我们根据公式找  $b_1$ , 在图示二维平面中, 与向量  $a_1$  对应的是基矢量  $a$ , 此时我们把基矢量  $b$  当做向量  $a_2$ , 手指向  $a_2$ ,  $a_3$  垂直于桌面向外, 右手指掌心从  $a_2$  转向  $a_3$ , 这个时候大拇指的方向就是 $k_a$ 的方向, 同理, 我们也可以用相同的方法找到 $k_b$ 的方向。我们在此基础上重新建立一个直角坐标系(如下图所示), 将代入上面公式中

$$V = \vec{a} \times \vec{b} \times \cos 120^\circ = 1 \times 1 \times \cos 120^\circ = \frac{\sqrt{3}}{2} \quad (3.2)$$

因为向量  $a_1, a_2, a_3$  的模长为 1, 再联立上面的式子, 可以求出倒矢量 $k_a$ 和 $k_b$ 所对应的数值为  $4\pi/\sqrt{3}$ , 在直角坐标系上画图

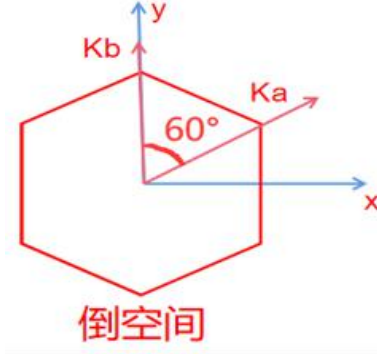


图 3.2 倒空间的  $K_a$  和  $K_b$

最后在直角坐标系中找到与它们相对应的坐标为

$$k_a = 2\pi \left(1, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), k_b = 2\pi \left(0, \frac{2}{\sqrt{3}}\right) \quad (3.3)$$

然后分别把  $a, b$  的模长设置为 1, 则在  $x-y$  坐标系中找到  $a, b$  的晶格基矢量分别为

$$\vec{a} = (1, 0); \vec{b} = \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right) \quad (3.4)$$

已知, 石墨烯中心到边长的垂直距离为  $1/2$ , 经过作图和计算可以得到石墨烯六方晶格的边长为  $1/\sqrt{3}$ , 参照上图, 可以通过更进一步计算得到最近邻连接矢量相对应的三个向量为:

$$\vec{e}_1 = \left(0, \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \quad \vec{e}_2 = \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right) \quad \vec{e}_3 = \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2\sqrt{3}}\right) \quad (3.5)$$

哈密顿量是指跃迁项就是从六方晶胞一个原子跃迁到相邻原子所需要的  $t$ , 其哈密顿可以表示为:

$$H = -t \sum_{i,j+\delta} C_{A,i}^+ C_{B,j+\delta} + h.c. \quad (3.6)$$

$h.c.$  表示为厄米共轭。

因为石墨烯是两带模型, 所以它写出来是  $2 \times 2$  的矩阵形式

$$\begin{pmatrix} 0 & H_{12} \\ H_{21} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

用常用符号可以表示为:

$$H_{12}(\vec{k}) = f(k) = -t \sum_{\delta} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{e}_i} \quad (3.8)$$

向量  $k$  为倒空间的, 具体可以表示为:  $\vec{k} = (k_x \vec{i} + k_y \vec{j} + k_z \vec{z})$ 。

写成矩阵形式, 其中常用的符号表示为:

$$f(k) = -t \left[ e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{e}_3} \right] \quad (3.9)$$

然后将上面所对应邻连接矢量代入可以得到:

$$f(k) = -t \left[ e^{i\frac{1}{\sqrt{3}}} + e^{i\left(-\frac{1}{2}k_x - \frac{1}{\sqrt{3}}k_y\right)} + e^{i\left(\frac{1}{2}k_x - \frac{1}{2\sqrt{3}}k_y\right)} \right] \quad (3.10)$$

高对称  $K(0, 4\pi/3)$ ,  $K'(0, -4\pi/3)$  以及它所对应的图像, 在倒空间的图中, Brillouin 区的两个点分别被标记为  $K$  和  $K'$ , 这是两个不等价的点, 它们属于两个不同的谷 (valley)。

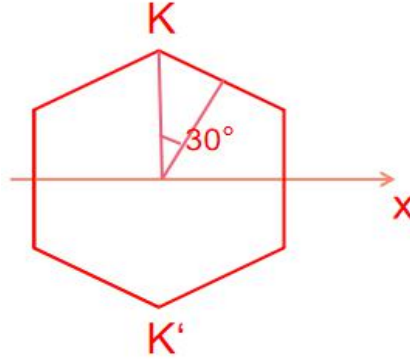


图 3.3 高对称  $K$  和  $K'$  的图像

### 3.2 石墨烯能带结构在 $K$ 处和 $K'$ 处泰勒展开

由于石墨烯能带在 Dirac 点线性色散, 根据 Dirac 点的能带性质, 在  $K$  点附近, 把两带模型进行泰勒展开【多元函数在  $(x_0, y_0)$  展开】可以得到

$$f(K + q) \approx f(K) + q_x \frac{\partial f(k)}{\partial k_x} \Big|_K + q_y \frac{\partial f(k)}{\partial k_y} \Big|_K \quad (3.11)$$

该式子等号第一项是 0 级近似, 第二、三项是一级近似, 0 级项通过计算为 0, 1 级项偏微分经过计算可以得到

$$\frac{\partial f(k)}{\partial k_x} = i\frac{1}{\sqrt{3}}e^{i\frac{1}{\sqrt{3}}k_x} - i\frac{1}{2\sqrt{3}} \left[ e^{i\left(-\frac{1}{2\sqrt{3}}k_x + \frac{1}{2}k_y\right)} + e^{i\left(-\frac{1}{2\sqrt{3}}k_x - \frac{1}{2}k_y\right)} \right] \quad (3.12)$$

所以  $K$  点在  $K(0, 4\pi/3)$  处的导数

$$\frac{\partial f(k)}{\partial k_x} \Big|_K = i \left[ \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \times 2 \cos(2\pi/3) \right] = \frac{\sqrt{3}}{2} i \quad (3.13)$$

再经过进一步计算可以得到

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(k)}{\partial k_y} \Big|_K &= 0 + i\frac{1}{2} \left[ e^{i\left[-\frac{1}{2\sqrt{3}}k_x + \frac{1}{2}k_y\right]} - e^{i\left(-\frac{1}{2\sqrt{3}}k_x - \frac{1}{2}k_y\right)} \right] \\ &= i \cdot \frac{1}{2} \left( e^{i\frac{1}{2}k_y} - e^{-i\frac{1}{2}k_y} \right) \\ &= i \cdot \frac{1}{2} \left[ \cos\left(2\pi/3\right) + i \sin\left(2\pi/3\right) - \left( \cos\left(2\pi/3\right) - i \sin\left(2\pi/3\right) \right) \right] \end{aligned}$$

$$= -\sin\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \quad (3.14)$$

最后可以得到

$$\begin{aligned} f(K + \vec{q}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2} t(q_x + iq_y) \\ f^*(K + \vec{q}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2} t(q_x - iq_y) \end{aligned} \quad (3.15)$$

那么与其相对应的哈密顿的矩阵形式算出来后，用泡利矩阵表示为

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

$$\begin{aligned} \hat{H}(K + q) &= \begin{pmatrix} 0 & f(K + \vec{q}) \\ f^*(K + \vec{q}) & 0 \end{pmatrix} = \frac{\sqrt{3}}{2} t \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} t (q_x \sigma_x - q_y \sigma_y) \end{aligned} \quad (3.17)$$

$K'$ 对  $f(k)$  在  $K$  点  $(0, -4\pi/3)$  处的导数

$$\partial f(k) / \partial k_x |_{K=i} \left[ \frac{1}{\sqrt{3}} - \frac{1}{2\sqrt{3}} \times 2 \cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) \right] = -\frac{\sqrt{3}}{2} i \quad (3.18)$$

再经过进一步计算可以得到

$$\begin{aligned} \partial f(k) / \partial k_y |_K &= 0 + i \frac{1}{2} \left[ e^{i \left[ -\frac{1}{dx^2} k_x + \frac{1}{2} k_y \right]} - e^{i \left( -\frac{1}{2\sqrt{2}} k_x + \frac{1}{2} k_y \right)} \right] \\ &= i \cdot \frac{1}{2} \left( e^{i \frac{1}{2} k_y} - e^{-i \frac{1}{2} k_y} \right) \\ &= i \cdot \frac{1}{2} \left[ \cos(-2\pi/3) + i \sin(-2\pi/3) - (\cos(-2\pi/3) - i \sin(-2\pi/3)) \right] \\ &= -\sin\left(-\frac{2\pi}{3}\right) = \frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned} \quad (3.19)$$

展开可以得到

$$\begin{aligned} f(K' + \vec{q}) &\approx \frac{\sqrt{3}}{2} t(-q_x + iq_y) = H_{12} \\ H_{21} &= H_{12}^+ = \frac{\sqrt{3}}{2} t(-q_x - iq_y) \end{aligned} \quad (3.20)$$

那么 $K'$ 所对应的哈密顿的矩阵形式为

$$\hat{H}(K) = \frac{\sqrt{3}}{2} t \begin{pmatrix} 0 & -q_x + iq_y \\ -q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

整理出来为

$$\hat{H}(K' + q) = \frac{\sqrt{3}}{2} t (-q_x \sigma_x - q_y \sigma_y) \quad (3.22)$$



### 3.3 谷指数 $\tau$

将上面所求出的两个哈密顿统一起来可以得到

$$\hat{H} = \frac{\sqrt{3}}{2}t(\tau q_x \sigma_x - q_y \sigma_y); \tau = \pm 1 \quad (3.23)$$

同理同样展开，也可以表示为文献中常见的形式

$$\hat{H} = \hbar v_F (\tau k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) \quad (3.24)$$

而其中公式中提到的 $\tau$ 就是谷指数。

这个时候再考虑自旋轨道耦合，添加一项

$$H_{\text{soc}} = \lambda_{\text{so}} \tau_z \sigma_z S_z \quad (3.25)$$

除此之外，还要加上空间反演对称破缺导致的交错晶格势 $\Delta/2 \sigma_z$ ，那么整个体系的哈密顿就变为：(这步可用 mathematica 直接求解)

$$\hat{H} = \hbar v_F (\tau k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \lambda_{\text{so}} \tau_z \sigma_z S_z + \frac{\Delta}{2} \sigma_z \quad (3.26)$$

最后快速求解法求解泡利矩阵形式哈密顿本征值可以看到，可以得到

$$\epsilon_K = \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + \left( \lambda_{\text{so}} \tau_z + \frac{\Delta}{2} \right)^2} \quad (3.27)$$

$\tau_z = \pm 1$  为能谷序数， $\Delta$ 是能隙大小。

里面符号 $\lambda_{\text{so}}$ 一个为正一个为负，具体表示为

$$\begin{aligned} \epsilon_K &= \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + \left( \lambda_{\text{so}} + \frac{\Delta}{2} \right)^2} \\ \epsilon_{K'} &= \pm \sqrt{\hbar^2 v_F^2 k^2 + \left( -\lambda_{\text{so}} + \frac{\Delta}{2} \right)^2} \end{aligned} \quad (3.28)$$

于是在其最简单的微扰交错晶格势跟 SOC 的共同作用下 K 和K'的能量产生了偏差，他们所对应的能量也已经不一样了，而与这个现象相对应的就是谷劈裂，具体情况如下图所示

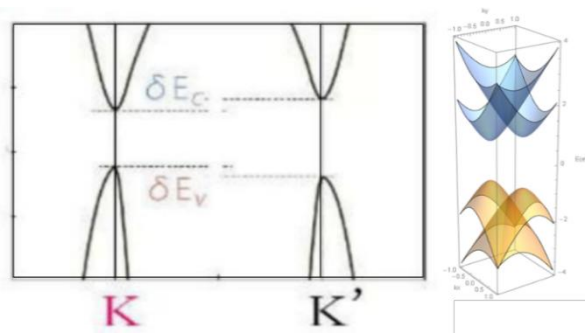


图 3.4 K 和 K' 谷劈裂的能带图像

## 4 Mathematica 程序对谷电子能带结构建立与分析

### 4.1 Mathematica graphene

我们将石墨烯能带结构的推导过程输入到 Mathematica 12.1（中英文）程序，可以得到下图所示的整个流程，整个流程的大致步骤为：我们将公众号的内容输入进去， $\tau$  表示轨道矩阵， $\sigma$  表示自旋。然后建立的是正空间和倒空间的基矢，把其他相关的数据全部写进去，再定义一个函数（注意：分号不输出，不加分号表示输出），输出一个结果后，代入下面做泰勒展开求偏导后再输入，先对  $x$  求偏导，求出来结果，命名为  $f(x)$ ，并对点位值进行赋值。再对  $y$  求偏导，泰勒展开第一项带进来数值为 0，其它项也就是把上面所对应的数值编入程序。HK 写成两个矩阵格式，特征值一求，输出的结果和上述一致的话，则推导正确。求出本征值后，就进行相关的画图。先在 K 点(Dirac 点)依据对应的特征值绘制三维图形，K' 点(Dirac 点)同样可按照一定边界比例绘制图形，绘制出来的图像有一定不透明度而且是三维的，我们通常把它称为狄拉克（Dirac）锥。此时再考虑自旋轨道耦合和晶格交错势，输出点和 K' 点所对应的矩阵表达形式，再对其完全化简可以求出本征值，设置不同的数值，然后分别在坐标轴绘制出 K 点和 K' 点谷劈裂的三维立体图像。

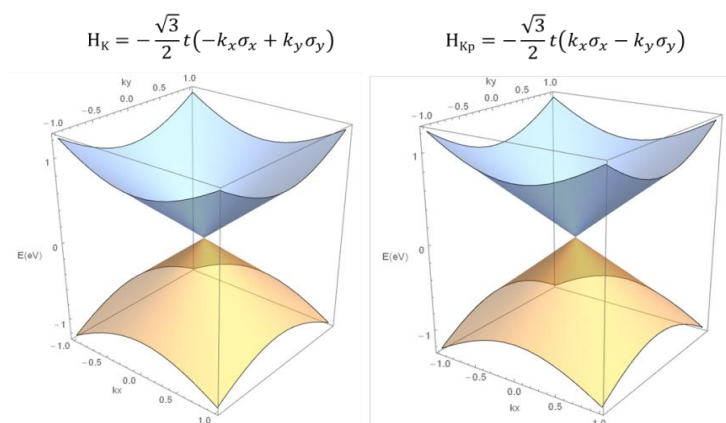


图 4.1 K 和 K' 谷能带色散关系

### 4.2 Mathematica MoS<sub>2</sub>

MoS<sub>2</sub> 的运行过程与 graphene 相似，但仍然存在不同的地方，具体存在差异的地方如下：

两带  $k, p$  模型：由下图 4.1 可明显知到,三带 NN TB 模型足以很好描述能带结

构，尤其是在 K 点谷(同样也适用于-K 点谷由于逆时对称)。因此,我们可以将式子

$$H^{NN}(k) = \begin{bmatrix} h_0 & h_1 & h_2 \\ h_1^* & h_{11} & h_{12} \\ h_2^* & h_{12}^* & h_{22} \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

用 Lowdin 方法展开成为两带 k.p 模型<sup>[9-11]</sup>。使用

$$|\psi_c^\tau\rangle = |d_{z^2}\rangle \text{ and } |\psi_v^\tau\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|d_{x^2-y^2}\rangle + i\tau|d_{xy}\rangle)(\tau = \pm \text{就是谷指数}) \quad (4.2)$$

为基矢，得到固定的两带 k.p（相对于 $\tau k$ 的三阶）模型为

$$H_{kp}^{(1)}(k;\tau) = \begin{bmatrix} \Delta/2 & at(\tau k_x - ik_y) \\ at(\tau k_x + ik_y) & -\Delta/2 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

$$H_{kp}^{(2)}(k;\tau) = H_{kp}^{(1)}(k;\tau) + a^2 \begin{bmatrix} \gamma_1 k^2 & \gamma_3(\tau k_x + ik_y)^2 \\ \gamma_3(\tau k_x - ik_y)^2 & \gamma_2 k^2 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

$$H_{kp}^{(3)}(k;\tau) = H_{kp}^{(2)}(k;\tau) + a^3 \begin{bmatrix} \gamma_4 \tau k_x (k_x^2 - 3k_y^2) & \gamma_6 k^2 (\tau k_x - ik_y) \\ \gamma_6 k^2 (\tau k_x + ik_y) & \gamma_5 \tau k_x (k_x^2 - 3k_y^2) \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

在哪个 $\Delta$ 是在 K 点的带隙， $\tau$ 和 $r_1 - r_6$ 是能量参数，以及 $k^2 = k_x^2 + k_y^2$ 。等式（4-2）在参考文献中是巨大的 Dirac 哈密顿量，它就是这样推导出来的。等式（4-3）和（4-4）与之前的工作是一致<sup>[12-13]</sup>。在图 4.2 中，来自 $H_{kp}$ 单分子层 MoS<sub>2</sub>能带捕获谷中主要的物理现象，但是忽视了诸如各向异性色散（三角弯曲）和电子空穴不对称性等细节，来自 $H_{kp}$ 的能带恢复了上述缺失的细节，因此来自 $H_{kp}$ 的能带则与第一性原理计算一致。

当 SOC 被视为一阶时，等式仍然有效

$$H_{soc}(k) = I_2 \otimes H_0(k) + H' = \begin{bmatrix} H_0(k) + \frac{\lambda}{2} L_z & 0 \\ 0 & H_0(k) - \frac{\lambda}{2} L_z \end{bmatrix} \quad (4.6)$$

进而我们便可以得

$$H_{kpso}^{(n)}(k;\tau,s) = H_{kp}^{(n)}(k;\tau) + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \tau s \lambda \end{bmatrix} \quad (4.7)$$

其中  $s=\pm 1$  是自旋指数（+1 表示向上，-1 表示向下），其中自旋是一个很好的量子数。等式（4-5）中 $\tau s \lambda$ 项以谷折射率 $\tau$ ，自旋指数 $s$ 和 SOC 参数 $\lambda$ 的形式出现，这意味着丰富的物理现象是由于参考文献中谷的 SOC 诱导和自旋耦合。

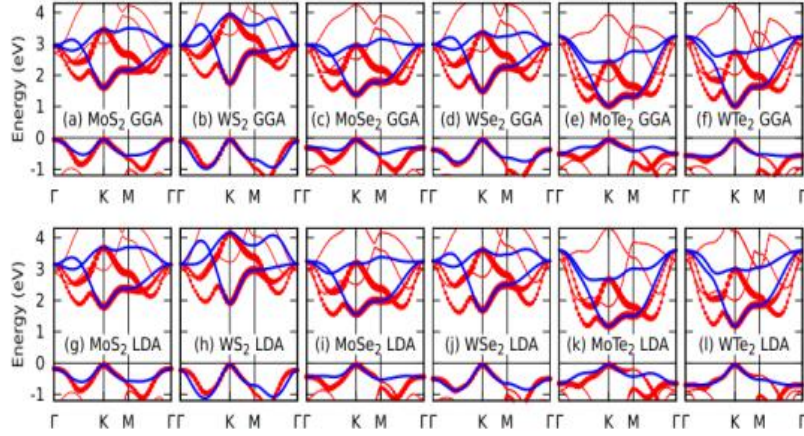


图 4.1（在线彩色）与 FP 单分子膜（红色或灰色曲线）相比，MX<sub>2</sub> 单分子膜的 NN-TB 带结构（蓝色或深色曲线）

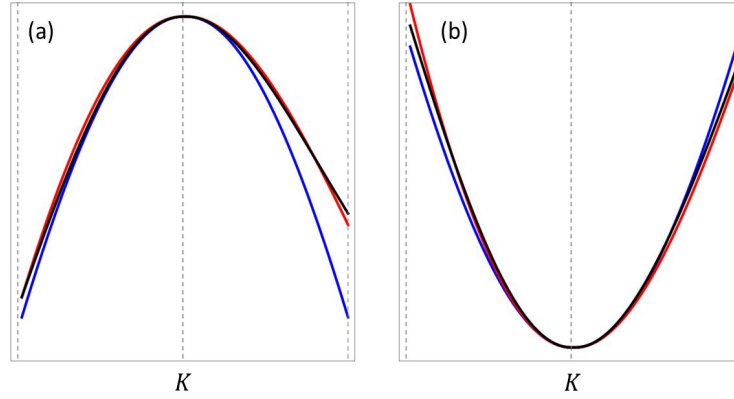


图 4.2（在线颜色）单层 MoS<sub>2</sub> 的 K 谷中的（a）价带和（b）导带，在  $\tau$  和 M 方向和  $0.1 \times 2\pi/a$  范围内，开放圆是 FP 结果（GGA 情况）。

（Color online）锯齿形 MoS<sub>2</sub>（见下图）的能带宽度为  $W=8$  的纳米带。红点是利用 GGA 参数建立的 TB 模型的能带。曲线是 FP 波段，其中蓝色表示  $d_{z^2}, d_{xy}$  以及  $d_{x^2-y^2}$  轨道的贡献，绿色表示其他的轨道<sup>[14]</sup>。

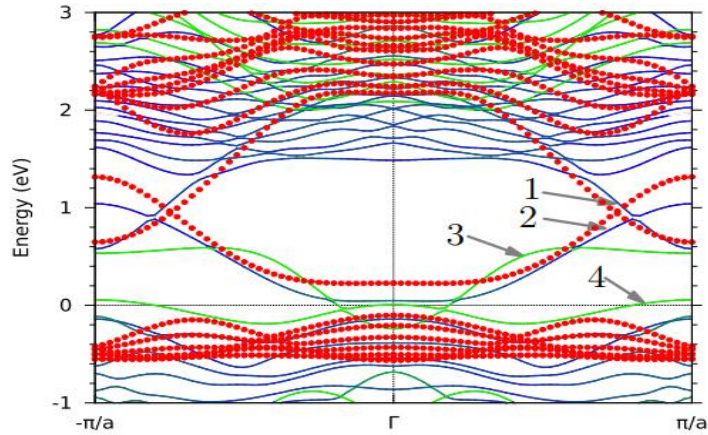


图 4.3（Color online）锯齿形 MoS<sub>2</sub> 的能带宽度为  $W=8$  的纳米带

## 5 总结与展望

在新时代到来之际，谷电子学器件有望成为新型电子器件的主流，它的研究将引发了一场概念性革命。本论文主要对谷电子能带结构进行了基础分析，不仅进一步了解谷电子能带结构的定义，也巧妙与 **Mathematica** 程序结合更清晰直观地看到石墨烯和单层二硫化钼谷劈裂的现象。其相关的研究仍具有深入的必要性，为了实现高性能的谷电子学器件这一目标仍需要能谷材料性质的深入探索和器件性能的进一步优化，所以希望有更多的科学工作者踊跃投身于谷电子学这一前沿学科的相关研究，并详细制定深入研究的方案，推动谷电子学的进一步的创新与发展。

## 参考文献

- [1] 尹伟红, 韩勤, 杨晓红. 基于石墨烯的半导体光电器件研究进展[J]. 物理学报, 2012, 61(24):12.
- [2] 孟莉. 单层二硫化钼的谷选择圆偏振光吸收性质的研究[J]. 科学, 2012, 64(4):26-26.
- [3] D. S. Wang, R. Q. Wu, and A. J. Freeman. Phys. Rev. B 47, 14932(1993).
- [4] H. Peelaers and C. G. Van de Walle. Phys. Rev. B 86, 241401(R)(2012).
- [5] R. Peng, Z. He, Q. Wu, Y. Dai, B. B. Huang, and D. Y. Ma. Phys. Rev. B 104, 174411 (2021).
- [6] X. l. Xu, Z. l. He, Y. Dai, B. B. Huang, and Y. D. Ma. Phys. Rev. B 104, 205430 (2021).
- [7] 阎守胜. 《固体物理基础》第三版. 北京大学出版社, 2011.
- [8] 黄昆. 固体物理学/北京大学物理学丛书. 北京大学出版社, 2009.
- [9] R. Winkler, Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems, Springer Tracts in Modern. Phys, Vol. 191 (Springer, Berlin, 2003).
- [10] P.-O. Lowdin, J. Chem. Phys. 19, 1396 (1951).
- [11] J. M. Luttinger and W. Kohn. Phys. Rev. 97, 869 (1955).
- [12] H. Rostami, A. G. Moghaddam, and R. Asgari. arXiv:1302.5901.
- [13] A. Kormanyos, V. Zolyomi, N. D. Drummond, P. Rakya, G. Burkard, and V. I. Fal'ko. Phys. Rev. B 88, 045416 (2013).
- [14] G. B. Liu, W. Y. Shan, Y. Yao, W. Yao, and D. Xiao. Phys. Rev. B 88, 085433 (2013).

## 附录

### 石墨烯部分 Mathematica 程序

固体物理正空间与倒空间关系，石墨烯两带模型哈密顿量如下

```
Clear["Global`*"];
```

[清除

(\*石墨烯的紧束缚模型以及在谷电子学方面内容\*)

(\* $\tau$  indicates orbit matrix;  $\sigma$  indicates spin matrix;\*)

(\*高对称点 $K=\{4\pi/3,0\}$ ,高对称点 $K_p=\{-4\pi/3,0\}$ \*)

(\*固体物理学, Unitcell vectors 正空间基矢\*)

(\*

$a=\{1,0,0\};$

$b=\{-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0\};$

$c=\{0,0,1\};$

\*)

(\* 固体物理学, Reciprocal space vectors 倒空间基矢\*)

(\*

$vol=a.Cross[b,c];$

$ka=2\pi Cross[b,c]/vol$

$kb=2\pi Cross[c,a]/vol$

$kc=2\pi Cross[a,b]/vol$

\*)



分别对 x 于 y 求偏微分，并取在高对称点 K 和K'的具体数值

(\*紧束缚模型的哈密顿量\*)

$$f_{12} = - \left( e^{\frac{i k y}{\sqrt{3}}} + e^{i \left( -\frac{k x}{2} - \frac{k y}{2 \sqrt{3}} \right)} + e^{i \left( \frac{k x}{2} - \frac{k y}{2 \sqrt{3}} \right)} \right) t;$$

$f_{21} = \text{ConjugateTranspose}[f_{12}];$

[共轭转置]

$$H = \begin{pmatrix} 0 & f_{12} \\ f_{21} & 0 \end{pmatrix}$$

$$f[kx\_ , ky\_ ] := e^{\frac{i k y}{\sqrt{3}}} + e^{i \left( -\frac{k x}{2} - \frac{k y}{2 \sqrt{3}} \right)} + e^{i \left( \frac{k x}{2} - \frac{k y}{2 \sqrt{3}} \right)};$$

(\*对x变量求偏导后分别取K点和Kp点坐标，D[f[x,y],x]\*)

$D[f[x, y], x];$

[偏导]

$$fx[x\_ , y\_ ] := -\frac{1}{2} i e^{i \left( -\frac{x}{2} - \frac{y}{2 \sqrt{3}} \right)} + \frac{1}{2} i e^{i \left( \frac{x}{2} - \frac{y}{2 \sqrt{3}} \right)};$$

$fxK = \text{Simplify}[fx[4 \pi / 3, 0]]$

[化简]

$fxKp = \text{Simplify}[fx[-4 \pi / 3, 0]]$

[化简]

(\*对y变量求偏导后分别取K点和Kp点坐标，D[f[x,y],y]\*)

$D[f[x, y], y];$

[偏导]

$$fy[x\_ , y\_ ] := \frac{i e^{\frac{i y}{\sqrt{3}}}}{\sqrt{3}} - \frac{i e^{i \left( -\frac{x}{2} - \frac{y}{2 \sqrt{3}} \right)}}{2 \sqrt{3}} - \frac{i e^{i \left( \frac{x}{2} - \frac{y}{2 \sqrt{3}} \right)}}{2 \sqrt{3}};$$

$fyK = \text{Simplify}[fy[4 \pi / 3, 0]]$

[化简]

$fyKp = \text{Simplify}[fy[-4 \pi / 3, 0]]$

[化简]



分别在高对称点 K 和K'的做泰勒展开

(\*K点处泰勒展开\*)

$$g[x_, y_] := e^{\frac{i y}{\sqrt{3}}} + e^{i \left(-\frac{x}{2} - \frac{y}{2\sqrt{3}}\right)} + e^{i \left(\frac{x}{2} - \frac{y}{2\sqrt{3}}\right)};$$

$$HK_{12} = \text{Simplify}[-t[\text{Simplify}[g[4\pi/3, 0]] + qx \text{Simplify}[fx[4\pi/3, 0]] + qy \text{Simplify}[fy[4\pi/3, 0]]]]$$

(\*HK<sub>21</sub>=ConjugateTranspose[HK<sub>12</sub>]\*)

$$(*HK = \begin{pmatrix} 0 & -t\left[-\frac{1}{2}\sqrt{3}(qx-iqy)\right] \\ -t\left[-\frac{1}{2}\sqrt{3}(qx+iqy)\right] & 0 \end{pmatrix}; *)$$

$$HK = \text{Simplify}\left[-\frac{\sqrt{3}}{2} t (qx \sigma_x + qy \sigma_y)\right] // \text{MatrixForm}$$

(\*Kp点处泰勒展开\*)

$$HKp_{12} = \text{Simplify}[-t[\text{Simplify}[g[-4\pi/3, 0]] + qx \text{Simplify}[fx[-4\pi/3, 0]] + qy \text{Simplify}[fy[-4\pi/3, 0]]]]$$

(\*HK<sub>p21</sub>=ConjugateTranspose[HK<sub>p12</sub>]\*)

$$(*HK = \begin{pmatrix} 0 & -t\left[\frac{1}{2}\sqrt{3}(qx+iqy)\right] \\ -t\left[\frac{1}{2}\sqrt{3}(qx-iqy)\right] & 0 \end{pmatrix}; *)$$

$$HKp = \text{Simplify}\left[-\frac{\sqrt{3}}{2} t (-qx \sigma_x + qy \sigma_y)\right] // \text{MatrixForm}$$

高对称点 K 处画三维狄拉克锥

(\*K点处, Dirac点\*)

$$t = 1;$$

$$HK = \frac{\sqrt{3}}{2} t (x \sigma_x - y \sigma_y);$$

$$(*HK = -\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\right) t \begin{pmatrix} 0 & i(x-y) \\ -i(x-y) & 0 \end{pmatrix}; *)$$

MatrixForm[HK];

[矩阵格式]

fK = Eigenvalues[HK];

[特征值]

Show[Plot3D[fK, {x, -1, 1}, {y, -1, 1}, AxesLabel → {"kx", "ky", "E (eV)"}],

[显示] [绘制三维图形]

[坐标轴标签]

Mesh → None, PlotStyle → Opacity[0.4]],

[网格]

[无]

[绘图样式]

[不透明度]

RegionFunction → Function[{x, y, z}, x^2 + y^2 ≤ 1],

[区域函数]

[纯函数]

BoxRatios → Automatic]

[边界框比例]

[自动]

## 高对称点K'处画三维狄拉克锥

```
(*K'点处, Dirac点*)
t = 1;
HKp =  $\frac{\sqrt{3}}{2} t (-x \sigma_x - y \sigma_y);$ 
(*HK= $-\frac{\sqrt{3}}{2} t \begin{pmatrix} 0 & i(x+y) \\ -i(x+y) & 0 \end{pmatrix}$ );*)
MatrixForm[HKp];
|矩阵格式
fKp = Eigenvalues[HKp];
|特征值
Show[Plot3D[fKp, {x, -1, 1}, {y, -1, 1}, AxesLabel → {"kx", "ky", "E (eV)"},
|显示 |绘制三维图形 |坐标轴标签
Mesh → None, PlotStyle → Opacity[0.4]],
|网格 |无 |绘图样式 |不透明度
RegionFunction → Function[{x, y, z}, x^2 + y^2 ≤ 1],
|区域函数 |纯函数
BoxRatios → Automatic]
|边界框比例 |自动
```

## 添加自旋轨道耦合以及晶格交错势

```
(*综上所述, K和K'点的哈密顿量为HK= $-\frac{1}{2} \sqrt{3} t (\tau k_x \sigma_x + k_y \sigma_y)$ ;其中,  $\tau = \pm 1$ *)
(*自旋轨道耦合Hsoc= $\lambda_{SO} \tau_z \sigma_z$ ;晶格交错势 $(\Delta/2) \sigma_z$ *)
(*H= $\hbar v_F (\tau k_x \sigma_x + k_y \sigma_y) + \lambda_{SO} \tau_z \sigma_z + (\Delta/2) \sigma_z$  此处,  $k^2 := x^2 + y^2$ *)
(*t=1;  $\tau_z = 1$ *)
HK =  $\hbar v_F (x \sigma_x + y \sigma_y) + \lambda_{SO} \tau_z \sigma_z + \frac{\Delta}{2} \sigma_z;$ 
MatrixForm[HK]
|矩阵格式
f = FullSimplify[Eigenvalues[HK]]
|完全简化 |特征值
HKp =  $\hbar v_F (-x \sigma_x + y \sigma_y) - \lambda_{SO} \tau_z \sigma_z + \frac{\Delta}{2} \sigma_z;$ 
MatrixForm[HKp]
|矩阵格式
f = FullSimplify[Eigenvalues[HKp]]
|完全简化 |特征值
```

## 分别画出 K 和K'处三维能带图

(\*画图K(0.3333,0.3333)部分\*)

$\Delta = 0.2$ ;  $\hbar = 1$ ;  $v_F = 2$ ;  $\tau_z = 1$ ;  $\lambda_{S0} = 0.8$ ;

$$HK = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} + \lambda_{S0} \tau_z & ((x - 0.3333) - i(y - 0.3333)) \hbar v_F \\ ((x - 0.3333) + i(y - 0.3333)) \hbar v_F & -\frac{\Delta}{2} - \lambda_{S0} \tau_z \end{pmatrix};$$

MatrixForm[HK];

[矩阵格式]

fK = Eigenvalues[HK];

[特征值]

FigureK = Show[Plot3D[fK, {x, -1, 1}, {y, -1, 1}, AxesLabel -> {"kx", "ky", "E (eV)"}, Mesh -> None, PlotStyle -> Opacity[0.4],

[显示] [绘制三维图形]

[坐标轴标签]

[网格] [无]

[绘图样式]

[不透明度]

RegionFunction -> Function[{x, y, z}, x^2 + y^2 <= 1], BoxRatios -> Automatic]

[区域函数]

[纯函数]

[边界框比例]

[自动]

(\*画图K'(-0.3333,-0.3333)部分\*)

$\Delta = 0.2$ ;  $\hbar = 1$ ;  $v_F = 2$ ;  $\tau_z = 1$ ;  $\lambda_{S0} = 0.8$ ;

$$HKp = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} - \lambda_{S0} \tau_z & (-(x + 0.3333) - i(y + 0.3333)) \hbar v_F \\ (-(x + 0.3333) + i(y + 0.3333)) \hbar v_F & -\frac{\Delta}{2} + \lambda_{S0} \tau_z \end{pmatrix};$$

MatrixForm[HKp];

[矩阵格式]

fKp = Eigenvalues[HKp];

[特征值]

FigureKp = Show[Plot3D[fKp, {x, -1, 1}, {y, -1, 1}, AxesLabel -> {"kx", "ky", "E (eV)"}, Mesh -> None, PlotStyle -> Opacity[0.4],

[显示] [绘制三维图形]

[坐标轴标签]

[网格] [无]

[绘图样式]

[不透明度]

RegionFunction -> Function[{x, y, z}, x^2 + y^2 <= 1], BoxRatios -> Automatic]

[区域函数]

[纯函数]

[边界框比例]

[自动]

## 单层 MoS<sub>2</sub> 部分 Mathematica 程序

Clear["Global`\*"];

[清除]

(\* (PHYSICAL REVIEW B 88,085433 (2013)) \*)

(\* Three-band tight-binding model, HNN \*)

(\* K和Kp点处的kp模型 \*)

$$H_{1kp} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} & a t (\tau kx - i ky) \\ a t (\tau kx + i ky) & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix};$$

$$H_{2kp} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} & a t (\tau kx - i ky) \\ a t (\tau kx + i ky) & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} + a^2 \begin{pmatrix} \gamma_1 (kx^2 + ky^2) & \gamma_3 (\tau kx + i ky)^2 \\ \gamma_3 (\tau kx - i ky)^2 & \gamma_2 (kx^2 + ky^2) \end{pmatrix};$$

$$H_{3kp} = \begin{pmatrix} \frac{\Delta}{2} & a t (\tau kx - i ky) \\ a t (\tau kx + i ky) & -\frac{\Delta}{2} \end{pmatrix} + a^2 \begin{pmatrix} \gamma_1 (kx^2 + ky^2) & \gamma_3 (\tau kx + i ky)^2 \\ \gamma_3 (\tau kx - i ky)^2 & \gamma_2 (kx^2 + ky^2) \end{pmatrix} + a^3 \begin{pmatrix} \gamma_4 \tau kx (kx^2 - 3 ky^2) & \gamma_6 (kx^2 + ky^2) (\tau kx - i ky) \\ \gamma_6 (kx^2 + ky^2) (\tau kx + i ky) & \gamma_5 \tau kx (kx^2 - 3 ky^2) \end{pmatrix};$$

## 致谢

与川师初见于四年前初秋暖阳，将于今年的盛夏蝉鸣暂别。在此期间，我真正理解了大学的意义，也完成了自我的成长和疗愈，进而成为一个温柔，坚定且有力量的人。对我而言，丰富的人生经历造就了独特的自我，进而改变我看待事物的方式，能够透过现象抓事物的本质。面对人生的低谷，我一次次打碎自我，实现了自我重塑，从而对自己有了更清晰的定位。成长的过程中会遇到不公和偏见，但正是因为我始终坚持自己的初心，让我不管在哪里，很幸运受到了很多爱的回馈，这些“回馈”化为我精神支撑的一部分让我更加坚定向上的道路。在此感谢所有努力工作的人，他们都坚守在各自的岗位为社会做贡献。在论文完成之际，谨向我的指导老师表示感谢，根据我的实际情况对我的论文提出了很多贵重的意见。最后，我觉得 00 后这部分群体是非常有活力和创造力的一部分人，他们在努力为社会创造更多可能性，他们用实力向社会表明了什么叫未来可期。本次论文撰写中多次提到的谷，也让我很自然联想到谷爱凌，她身上那种积极向上的态度，值得我们所有人学习。希望与诸君共勉，为实现共同富裕而不懈努力！