石墨烯态密度计算

王启骅 PB20020580

2022 年 12 月 8 日

1 自由电子情况

石墨烯结构为六角晶胞如图1，边长为 a，面积 $S=\frac{3\sqrt{3}}{2}a^2$，一个原胞中存在两种原子，其中红色和绿色各一种。可

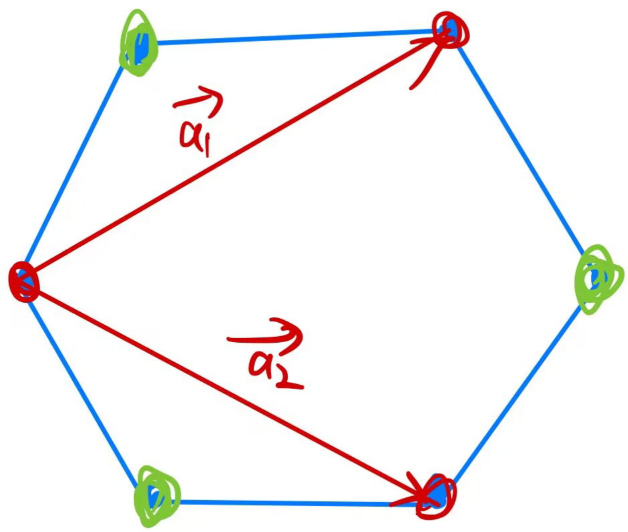

图 1: 石墨烯晶胞

以得到平移不变的矢量

$$\begin{cases}\vec{a_1}=\frac{3}{2}a\hat{x}+\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y}\\ \vec{a_2}=\frac{3}{2}a\hat{x}-\frac{\sqrt{3}}{2}a\hat{y}\end{cases} \tag{1}$$

根据周期性边界条件

$$\psi(x,y)=\psi(x+\frac{3}{2}a,y\pm\frac{\sqrt{3}}{2}a) \tag{2}$$

得到波矢满足条件

$$\exp(i\vec{k}\cdot\vec{a_1})=\exp(i\vec{k}\cdot\vec{a_2})=1 \tag{3}$$

得到

$$\begin{cases} k_x = \frac{2\pi}{3a}(n_1+n_2) \\ k_y = \frac{2\pi}{\sqrt{3}a}(n_1-n_2) \end{cases} \tag{4}$$

则波矢 k 空间中可以取得的点为 一个态所占的面积为 $\Delta\vec{k} = \frac{8\pi^2}{3\sqrt{3}a^2} = \frac{4\pi^2}{S}$, 由 k 空间中电子态均匀分布,

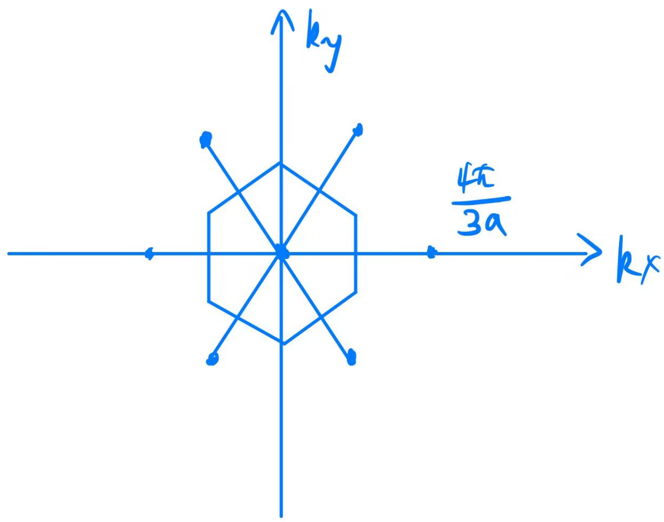

图 2: k 空间电子态分布

$$\rho(k) = \frac{S}{4\pi^2} \tag{5}$$

在半径为 k 的圆中，能态总数

$$Z(E) = 2\rho(k)\pi k^2 = S\frac{mE}{\pi\hbar^2} \tag{6}$$

可得态密度

$$N(E) = \frac{d\frac{Z}{S}}{dE} = \frac{m}{\pi\hbar^2} \tag{7}$$

可见该态密度为常数，与 E 无关。

2 紧束缚近似

由于自由电子情况下态密度为常数，接下来进一步考虑紧束缚近似下的态密度。对于石墨烯，一个原胞中含有两个原子。取晶体原胞所组成的点阵由图3

考虑最近邻原胞的作用，

$$\begin{aligned} E = E_0 - J_1\big(&\exp(-(k_x\frac{3}{2}a + k_y\frac{\sqrt{3}}{3}a)) + \exp(-(k_x\frac{3}{2}a - k_y\frac{\sqrt{3}}{3}a)) + \exp(-k_y\sqrt{3}a) + \exp(k_y\sqrt{3}a) \\ &+ \exp(-(-k_x\frac{3}{2}a + k_y\frac{\sqrt{3}}{3}a)) + \exp(-(-k_x\frac{3}{2}a - k_y\frac{\sqrt{3}}{3}a))\big) \\ = E_0 - 2J_1&\big(2\cos(\frac{3}{2}ak_x)\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) + \cos(\sqrt{3}ak_y)\big) \end{aligned} \tag{8}$$

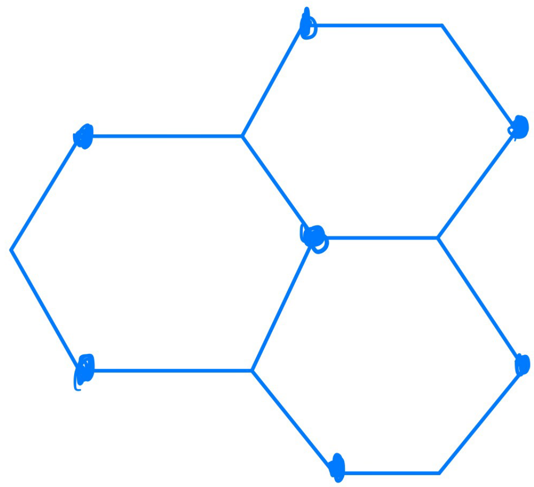

图 3: 石墨烯原胞点阵

$$\nabla_k E = 2J_1\big(3a\sin(\frac{3}{2}ak_x)\cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)\hat{k_x} + \sqrt{3}a\cos(\frac{3}{2}ak_x)\sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)\hat{k_y} + \sqrt{3}a\sin(\sqrt{3}ak_y)\hat{k_y}\big) \tag{9}$$

则可得到能态密度

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{2}{4\pi^2}\int_E \frac{dl}{|\nabla_k E|} \\ &= \frac{1}{4\pi^2 aJ_1}\int_E \frac{dl}{\sqrt{9\sin^2(\frac{3}{2}ak_x)\cos^2(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) + 3(\cos(\frac{3}{2}ak_x)\sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) + \sin(\sqrt{3}ak_y))^2}} \end{aligned} \tag{10}$$

该积分沿等能线 E 进行，即可得到在该能量下的能态密度。