

# Зонная структура графена

**Зонная структура графена** рассчитана в 1947 году в статье <sup>[1]</sup>. На внешней оболочке атома углерода находится 4 электрона, три из которых образуют  $sp^2$  **гибридизированные** связи с соседними атомами в решётки, а оставшийся электрон находится в  $2p_z$  состоянии (именно это состояние отвечает за образование межплоскостных связей в **графите**). В нашем рассмотрении он отвечает за образование энергетических зон графена.

## 1. Вывод

В приближении сильно связанных электронов полная волновая функция всех электронов кристалла запишется в виде суммы волновых функций электронов из разных подрешёток

$$\psi = \phi_1 + \lambda \phi_2, \quad (1.1)$$

где коэффициент  $\lambda$  — параметр, который определяется из системы уравнений (1.6). Входящие в уравнение волновые функции  $\phi_1$  и  $\phi_2$ , которые по смыслу означают амплитуды волновых функций на определённой подрешётке кристалла, запишутся в виде суммы волновых функций отдельных электронов в различных подрешётках кристалла

$$\phi_1 = \sum_A e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A} X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A), \quad (1.2)$$

$$\phi_2 = \sum_B e^{2\pi i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_B} X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B). \quad (1.3)$$

Здесь  $\mathbf{r}_A$  и  $\mathbf{r}_B$  — радиус-векторы направленные на узлы кристаллической решётки, а  $X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A)$  и  $X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B)$  — волновые функции электронов, локализованных вблизи этих узлов. В приближении сильно связанных электронов мы можем пренебречь перекрытием волновых функций соседних атомов.

$$S_{12} = \int X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) d\mathbf{r} = 0 \quad (1.4)$$

Теперь подставив в уравнение Шрёдингера  $H\psi = E\psi$  нашу волновую функцию (1.1) получим для энергетического спектра носителей и неизвестного параметра  $\lambda$  следующую систему уравнений

$$H_{11} + \lambda H_{12} = ES + ES_{12}\lambda$$

$$H_{21} + \lambda H_{22} = \lambda ES + ES_{12} \quad (1.5)$$

или в матричном виде

$$\begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ES & ES_{12} \\ ES_{12} & ES \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

где используются следующие обозначения для инте-

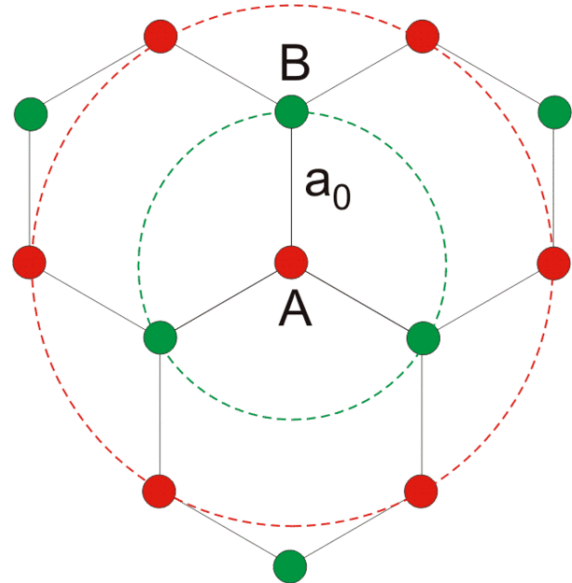


Рис. 1: Ближайшие атомы в окружении центрального узла (A) решётки. Красная пунктирная окружность соответствует ближайшим соседям из той же самой подрешётки кристалла (A), а зелёная окружность соответствует атомам из второй подрешётки кристалла (B).

гралов

$$H_{jj} = \int \phi_j^* H \phi_j d\mathbf{r} \quad (1.7)$$

$$H_{12} = H_{21}^* = \int \phi_1^* H \phi_2 d\mathbf{r} \quad (1.8)$$

$$S = \int \phi_j^* \phi_j d\mathbf{r} \quad (1.9).$$

Которую можно решить относительно  $E$ .

$$E = \frac{1}{2S} \left( H_{11} + H_{22} \pm \sqrt{(H_{11} - H_{22})^2 + 4|H_{12}|^2} \right)$$

Здесь можно сделать некие упрощения

$$S = N,$$

$$H_{11} = H_{22},$$

$$H'_{11} = H'_{22} = \frac{1}{N} H_{11} = \frac{1}{N} H_{22},$$

$$H'_{12} = \frac{1}{N} H_{12}, \quad (1.10)$$

где  $N$  — число элементарных ячеек в кристалле. С этими равенствами мы приходим к уравнению

$$E = H'_{11} \pm |H'_{12}| \quad (1.11)$$

Это уравнение мы тоже упростим, избавившись от первого слагаемого, которое соответствует некой постоянной энергии и малому изменению энергии по сравнению со вторым членом, отвечающим интегралу перекрытия волновых функций соседних атомов из той же подрешётки (А). Другими словами — взаимодействию волновой функции центрального атома с волновыми функциями атомов, расположенных на красной окружности (см. Рис. 1). Нас будет интересовать только особенность спектра связанного со вторым слагаемым, которое зависит от интегралов перекрытия ближайших атомов из разных подрешёток (А) и (В) (центральный атом и атомов на зелёной окружности). Энергетический спектр запишется в виде

$$E = \pm |H'_{12}| \quad (1.12)$$

Интеграл перекрытия можно представить в виде

$$\gamma_0 = - \int X^*(\mathbf{r} - \rho) H X(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (1.13)$$

где  $\rho$  — радиус-вектор направленный в позиции ближайших соседей. Для величины  $H'_{12}$  после подставления волновых функций (1.2) и (1.3) в выражение (1.8) получим

$$H'_{12} = \frac{1}{N} \sum_{A,B} \exp[-2\pi i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B)] \int X^*(\mathbf{r} - \mathbf{r}_A) H X(\mathbf{r} - \mathbf{r}_B) d\mathbf{r}. \quad (1.14)$$

Откуда после некоторых упрощений и используя координаты для ближайших соседей (1.3) получим

$$H'_{12} = -\gamma_0 \left( \exp[-2i\pi k_x(a/\sqrt{3})] + 2 \cos \pi k_y a \exp[2i\pi k_x(a/\sqrt{3})] \right). \quad (1.15)$$

В итоге приходим к интересующему нас энергетическому спектру вида

$$E = \pm \sqrt{\gamma_0^2 \left( 1 + 4 \cos^2 \pi k_y a + 4 \cos \pi k_y a \cos \pi k_x \sqrt{3} a \right)}, \quad (1.16)$$

где знак «+» соответствует электронам, а «-» — дыркам.

## 2. См. также

- [Графен](#)
- [Уравнение Дирака для графена](#)

## 3. Примечания

- [1] Wallace P. R. «The Band Theory of Graphite», Phys. Rev. **71**, 622 (1947) DOI:10.1103/PhysRev.71.622

## 4. Источники текстов и изображения, авторы и лицензии

### 4.1. Текст

- **Зонная структура графена** *Источник:* [https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%97%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D0%B0%D1%8F\\_%D1%81%D1%82%D1%80%D1%83%D0%BA%D1%82%D1%83%D1%80%D0%B0\\_%D0%B3%D1%80%D0%B0%D1%84%D0%B5%D0%BD%D0%B0?oldid=48736090](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%97%D0%BE%D0%BD%D0%BD%D0%B0%D1%8F_%D1%81%D1%82%D1%80%D1%83%D0%BA%D1%82%D1%83%D1%80%D0%B0_%D0%B3%D1%80%D0%B0%D1%84%D0%B5%D0%BD%D0%B0?oldid=48736090) *Авторы:* Ququ, Четыре тильды, Generous, Castaway~ruwiki, Ботильда и Аноним: 3

### 4.2. Изображения

- **Файл:Graphene\_Nearest\_Neighbors.gif** *Источник:* [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/ce/Graphene\\_Nearest\\_Neighbors.gif](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/ce/Graphene_Nearest_Neighbors.gif) *Лицензия:* CC BY-SA 3.0 *Авторы:* Corel Draw File *Художник:* Alexander Mayorov
- **Файл:Wikipedia\_interwiki\_section\_gear\_icon.svg** *Источник:* [https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c9/Wikipedia\\_interwiki\\_section\\_gear\\_icon.svg](https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/c/c9/Wikipedia_interwiki_section_gear_icon.svg) *Лицензия:* Public domain *Авторы:* Universal Language Selector extension of MediaWiki, <https://github.com/wikimedia/mediawiki-extensions-UniversalLanguageSelector/blob/master/resources/images/cog-sprite.svg> *Художник:* Wikimedia Foundation; Santhosh Thottingal <santhosh.thottingal@gmail.com> (according to File:Cog-ULS-gear-latest.png);

### 4.3. Лицензия

- Creative Commons Attribution-Share Alike 3.0