 ; 

 ;  ; .

Рассмотрим в приближении сильной связи электронные волновые функции, определенные на узлах подрешеток А и В

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.1) |

где  – число элементарных ячеек,  – квазиволновой вектор,  – атомная волновая функция -электрона, – радиус-векторы, определяющие положение атомов в подрешетках А и В, суммирование в формуле (1.1) ведется по положению узлов в подрешетках. Координатную волновую функцию *π*–электрона графена будем искать в виде суперпозиции:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.2) |

 -коэффициенты. Уравнение Шредингера для –электрона с волновой функцией (1.2)  может быть представлено в матричном виде для коэффициентов . Будем считать отличными от нуля матричные элементы оператора Гамильтона  и равным нулю интеграл перекрытия . Решение уравнения Шредингера в данном случае позволяет найти энергию *π*-электрона

|  |  |
| --- | --- |
| ,  **,** | (1.3) |

 матричные элементы, построенные на атомных волновых функциях, определяют амплитуды перехода электрона между ближайшими атомными соседями (см. рис.1.1),  – энергия связи -электрона с атомом (в дальнейшем будет полагаться равной нулю). Вследствие симметрии решетки графена, матричные элементы . На рис. 1.2 построен по формуле (1.3) энергетический спектр π-электронов графена. Как следует из рис.1.2 и рис.1.1 энергетическая щель в спектре -электронов графена обращается в ноль в вершинах зоны Бриллюена, помеченных на рис.1.1 индексами  и . Заметим, первый теоретический анализ электронной структуры графена с использованием приближения сильной связи был сделан P. R.Wallace в 1946г [13] .

Из формулы (1.1) следует: вблизи точек  и  зоны Бриллюена энергетический спектр линеен и низкоэнергетические возбуждения представляют собой безмассовые фермионы Дирака, двигающиеся со скоростью , которая почти в 300 раз меньше, чем скорость света .

Рассмотрим низкоэнергетические возбуждения вблизи точек  и  зоны Бриллюена, координатную волновую функцию электрона представим в виде суперпозиции состояний электрона на подрешетках А и В и эквивалентных состояний вблизи точек  и . В результате волновая функция может быть записана в виде [13]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.4) |

,,, – комплексные коэффициенты,  – волновой вектор. Уравнение Шредингера  с волновой функцией (1.4) может быть представлено в матричном виде для коэффициентов ,,,. Отличны от нуля матричные элементы оператора Гамильтона  и , положим равными нулю интегралы перекрытия . В результате матрица оператора Гамильтона в приближении  примет вид

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.5) |

спектр электрона в данном приближении определится как собственные значения оператора (1.5). Заметим, матрица (1.5) имеет блочный вид и блоки 2×2 соответствуют матрицам оператора Гамильтона –электрона вблизи точек  и 

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.6) |

с собственными значениями для энергии ,  – скорость носителей, – постоянная Планка. В точках высокой симметрии зоны Бриллюена энергетическая щель в спектре электронов обращается в ноль, вблизи этих точек закон дисперсии носителей имеет линейный характер, соответственно в длинноволновом пределе гамильтонианы электронов вблизи точек  и , в соответствии с (1.6), могут быть представлены в виде линейных операторов по импульсу [13,14]:

|  |  |
| --- | --- |
| ,  , | (1.7) |

где  – компоненты оператора импульса, – матрицы Паули. Собст-венные функции оператора  в (1.7) – двухкомпонентные псевдоспиноры [15]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.8) |

параметр – определяет положительную и отрицательную ветви энергии (1.1) спектра, *θ* – угол между вектором  и осью OX, – энергия состояния.

Для -электрона с гамильтонианом  (1.7) первая и вторая компоненты псевдоспинорной волновой функции определяют плотность вероятности локализации электрона на подрешетках А и В.

Рассмотрим задачу об энергетическом спектре электронов графена в магнитном поле. Для этого матрице (1.5) сопоставим оператор Гамильтона, в котором компоненты волнового вектора  заменены на операторы обобщенного импульса:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.9) |

 – обобщенный импульс, – векторный потенциал. Задача о спектре оператора (1.9) для электрона в магнитном поле, направленном перпендикулярно плоскости графена приводит к дискретному спектру для уровней Ландау [16,17]:

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.10) |

где  – циклотронная частота,  – магнитная длина, значение индекса уровня Ландау  может быть положительным или отрицательным. Положительные значения энергии соответствуют электронам в зоне проводимости, отрицательные значения соответствуют дыркам. Из формулы (1.10) следует: в отличие от двумерной электронной системы с квадратичным по импульсу Гамильтонианом, в графене уровни Ландау не эквидестантны. Относительно большое расстояние между уровнями Ландау (например, разность энергий между первым и нулевым уровнем Ландау в магнитном поле величиной порядка десятка Тесла составляет почти ) позволяет наблюдать квантовый

эффект Холла в доступных магнитных полях для графена даже при комнатной температуре [16,17].

Заметим, операторы Гамильтона (1.7) линейны по оператору импульса, в литературе известны для двумерных систем и другие примеры линейных по оператору импульса форм, которые определяют взаимодействие. Так для несимметричного по поперечной координате потенциала удерживающего электрон в двумерной квантовой яме имеет место спин-орбитальное взаимодействие Рашбы

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.11) |

где -параметр. Для структур не имеющих центра инверсии рассматривается спин-орбитальное взаимодействие в форме Дрессельхауза [18,19]

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.12) |

где коэффициент  определяется материалом и геометрией образца. В работах [20,21] рассмотрена общая ситуация двумерной структуры с гамильтонианом, содержащим квадратичные и линейные по импульсу слагаемые в форме Рашбы и Дрессельхауза

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.13) |

где – эффективная масса. Собственные функции оператора Гамильтона (1.13) и собственные значения имеют вид:

|  |  |
| --- | --- |
| , , | (1.14) |

где ,  определяется из формулы

|  |  |
| --- | --- |
| , | (1.15) |

*ϕ* - угол между направлением вектора  и направлением оси ОХ.

В модели сильной связи энергия электрона определяется через два квантовых числа: магнитное квантовое число =0,±1,±2,±3,… и волновой вектор :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1.18) |

 матричные элементы, построенные на атомных волновых функциях, определяют амплитуды перехода электрона между ближайшими атомными соседями на углеродной нанотрубке (см. рис.1.3). Напомним, в формуле (1.18) как и в формуле (1.3),  – энергия связи -электрона с атомом, в дальнейшем будет полагаться равной нулю.