

## МЕТОД СИЛЬНО СВЯЗАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ДИСПЕРСИОННОГО СООТНОШЕНИЯ ДЛЯ ЭНЕРГИИ ГРАФЕНА

М.А. Мосин

med-aid@yandex.ru

МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация

---

### Аннотация

Решена проблема учета варьирования параметров наноструктур на основе графена путем проведения численных экспериментов. Использован альтернативный молекулярно-динамическому симулированию метод сильно связанных электронов для решения уравнения Шредингера. Описана реализация данного метода для  $\pi$ -электронов в слое графена. Получено дисперсионное соотношение для энергии графена. Представленные результаты могут быть использованы для нахождения зонной структуры одностенных углеродных нанотрубок и изучения их электронных свойств

### Ключевые слова

Углеродная нанотрубка, графен, электрическая проводимость графена, метод сильно связанных электронов, дисперсионное соотношение для энергии, функции Блоха, зоны Бриллюэна, точки Дирака

Поступила в редакцию 02.03.2017

© МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2017

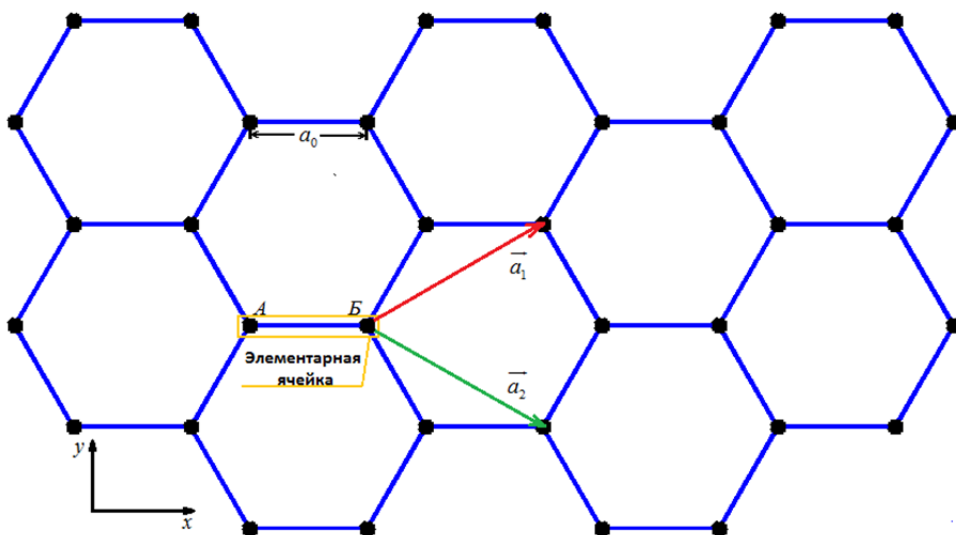
---

В 1952 г. Л.В. Радужкевич и В.М. Лукьянович опубликовали снимки трубок из углерода диаметром приблизительно 50 нм [1]. Лишь в 1991 г. после изучения осадка, образующегося на катоде при распылении графита в электрической дуге, японским исследователем Иджима, углеродные нанотрубки привлекли внимание ученых [2].

Эксперименты показали, что углеродные нанотрубки обладают уникальными электрическими [3–6], термическими [3, 7] и механическими свойствами [8–12], а также предел прочности в 20 раз больше, чем у стали [8], и модуль Юнга порядка терапаскаль [9]. Установлены высокие значения плотности тока [12] и очень высокие сопротивления электромиграционной деградации нанотрубок [13], благодаря этому они могут заменить металлы подобные алюминию и меди в интегральных схемах [12, 14, 15].

Экспериментально изучить свойства нанотрубок затруднительно ввиду их малых размеров. Однако использование молекулярных динамических симуляций, которое является мощным и полезным инструментом изучения углеродных нанотрубок в различных приложениях, помогает решить эту проблему [17, 18]. Другим методом, позволяющим изучать свойства нанотрубок, является метод сильно связанных электронов. Данный метод используется в основном для моделирования и изучения электронных свойств наноструктур на основе графена, а точнее их зонной структуры. Связано это с тем, что для получения зонной структуры исследуемой нанотрубки необходимо, в первую очередь, создать модель дисперсионного соотношения для энергии графена. Решать обозначенную задачу будем с помощью метода сильно связанных электронов.

**Структура графена и нанотрубки.** Графен (графитовый слой) — это плоскость, сформированная атомами углерода, которые, благодаря ковалентной связи между ними, формируют шестиугольную решетку (рис. 1). Длина ковалентной связи между двумя атомами  $a_0$  составляет от 0,142 до 0,144 нм. Графитовый слой рассматривается как решетка, сформированный элементарными ячейками двух соседних атомов «А» и «Б», повторяющихся в направлении базисных векторов  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$



**Рис. 1.** Графитовый слой в виде решетки элементарных ячеек, состоящих двух атомов:

А — левый атом углерода элементарной ячейки; Б — правый атом углерода элементарной ячейки;  $a_0$  — длина ковалентной связи между двумя атомами углерода;  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$  — базисные вектора, указывающее направления повторяющихся атомов «А» или «Б» элементарных ячеек

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \frac{3a_0}{2}\vec{i} + \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\vec{j}; \\ \vec{a}_2 &= \frac{3a_0}{2}\vec{i} - \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\vec{j}.\end{aligned}\tag{1}$$

Позиция любой элементарной ячейки  $\vec{R}$  на шестиугольной решетке может быть описана с помощью целых чисел  $m'$  и  $n'$ :

$$\vec{R} = m'\vec{a}_1 + n'\vec{a}_2.\tag{2}$$

Углеродными нанотрубками называют протяженные цилиндрические структуры, состоящие из свернутых гексагональных сеток с атомами углерода в узлах, полученных при сворачивании слоя графена без шва.

Нанотрубки могут быть разделены на одностенные, полученные путем сворачивания только одного слоя графита (SWCNT), или многостенные, представляю-

щие собой систему находящихся внутри одностенной нанотрубки нескольких других, но меньших по размеру нанотрубок (MWCNT). Отметим также, что нанотрубки имеют диаметр от 0,4 до 100 нм, длину — от 1 мк до 1 мм [15]. Направления сворачивания графитового слоя определяются вектором хиральности  $\vec{C}_h$  [17]:

$$\vec{C}_h = m\vec{a}_1 + n\vec{a}_2, \tag{3}$$

где  $m$  и  $n$  — количество элементарных ячеек нанотрубки в направлениях векторов  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$ .

В соответствии с вектором хиральности  $\vec{C}_h$ , нанотрубки могут быть ахиральными (симморфными) или хиральными (несимморфными) [12]. При этом только два типа нанотрубок можно назвать ахиральными — «кресло» (armchair) и «зигзаг» (zigzag) (рис. 2).

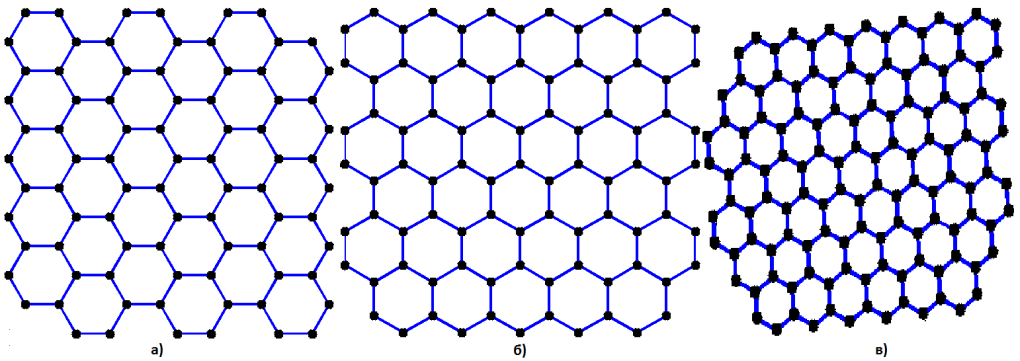


Рис. 2. Ахиральные (а — «кресло», б — «зигзаг») и хиральные (в) нанотрубки

Углеродные нанотрубки типа «кресло» называют такие нанотрубки, в которых хиральный вектор  $\vec{C}_h$  параллелен оси  $X$ , а поэтому угол  $\theta$  между хиральным вектором  $\vec{C}_h$  и вектором  $\vec{a}_1$  составляет  $30^\circ$  и  $m = n$ .

Углеродные нанотрубки типа «зигзаг» — это такие нанотрубки, в которых хиральный вектор  $\vec{C}_h$  параллелен оси  $Y$ , но из-за гексагональной симметрии шестиугольной решетки угол  $\theta$  между хиральным вектором  $\vec{C}_h$  и вектором  $\vec{a}_1$  составляет  $0^\circ$ ,  $m$  представляет собой любое положительное целое число, в то время как  $n = 0$ .

Для хиральных нанотрубок угол  $\theta$  принимает любые значения, за исключением  $0^\circ$  и  $30^\circ$ . Хиральный вектор  $\vec{C}_h$  может принимать любые положительные целые значения, кроме  $m = n$  и  $n = 0$ .

Еще одним важным вектором является вектор трансляции (смещения)  $\vec{T}$ , который определяет периодичность структуры в направлении, перпендикулярном направлению хирального вектора  $\vec{C}_h$  (рис. 3). Находим вектор трансляции

$$\vec{T} = t_1 \vec{a}_1 + t_2 \vec{a}_2, \quad (4)$$

где  $t_1 = \frac{2n+m}{d_R}$  и  $t_2 = -\frac{2m+n}{d_R}$ ,  $d_R$  — наибольший возможный делитель  $2n+m$  и  $2m+n$ .

**Электронная структура графена.** Углеродный атом в основном состоянии имеет шесть электронов с электронной конфигурацией атома  $1s^2 2s^2 2p^2$ . Два из шести электронов находятся на первом энергетическом уровне ( $1s$ -орбиталь); эти электроны сильно связаны с ядром. Остальные четыре электрона занимают второй энергетический уровень: два занимают  $2s$ -орбиталь, другие два —  $2p$ -орбиталь, где каждый электрон занимает свой суборбитальный уровень  $2p_x, 2p_y$ . Таким образом каждый углеродный атом имеет четыре валентных электрона на самом высоком (для углерода), втором, энергетическом уровне. Это означает, что каждый атом имеет четыре ковалентных связи с соседними атомами для достижения равновесного состояния.

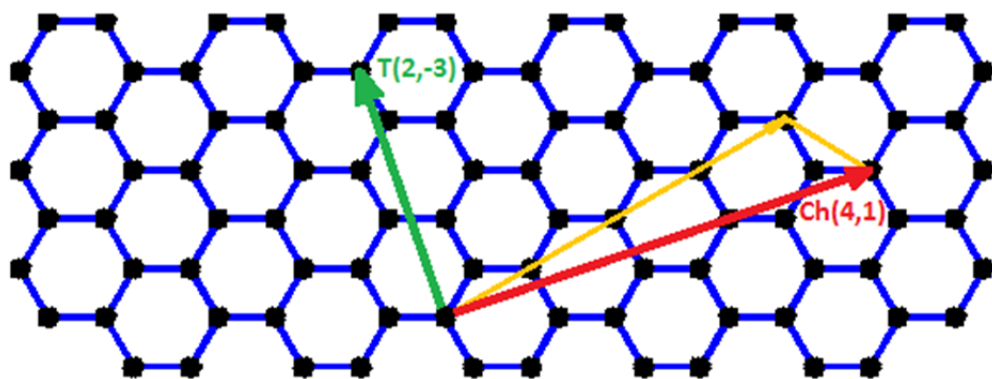


Рис. 3. Вектор хиральности нанотрубки  $\vec{C}_h$  и соответствующий ей вектор трансляции  $\vec{T}$

Формирование ковалентной связи между углеродными атомами в графене может быть описано следующим образом:

1) один из двух  $2s$ -электронов переходит на свободную  $2p_z$ -суборбиталь. Данный переход возможен вследствие малой разницы энергии между  $2s$ - и  $2p$ -орбиталями;

2) поскольку разница энергии между  $2s$ - и  $2p$ -орбиталями в атоме углерода мала, по сравнению с энергией связи между атомами, волновые функции для  $2s$ -,  $2p_x$ - и  $2p_y$ -орбитальных электронов могут быть представлены в виде суперпозиции состояний  $sp^2$ . Данный процесс объединения орбиталей называют гибридизацией. Четырех валентный электрон остается на  $2p_z$ -орбитали;

3) три  $sp^2$  электрона формируют сильные ковалентные связи с тремя другими соседними углеродными атомами под углом  $120^\circ$ . Таким образом, образуется похожий на пчелиные соты слой графена. Сильные ковалентные связи называют

$\sigma$  — связь [18]. Такая связь между двумя атомами углерода является сильнейшей из известных межатомных связей, что объясняет особые механические свойства нанотрубок [12];

4) находящийся на  $2p_z$ -суборбитали, перпендикулярной плоскости графитового слоя, электрон связывает «свой» углеродный атом с одним из трех соседних углеродных атомов, формируя  $\pi$ -связь. В отличие от  $\sigma$ -связи,  $\pi$ -связь слабая делокализованная ковалентная связь, которая легко разрывается и легко возникает, что приводит к изменению структуры связей в пространственной системе.

Таким образом, электрическая проводимость графена и, соответственно, углеродной нанотрубки может быть отнесена к  $2p_z$   $\pi$ -электрону, в то время как другие три валентных электрона влияния на проводимость углеродной структуры не оказывают. Поэтому метод сильно связанных электронов также называют  $p_z$  орбитальной моделью.

**Метод сильно связанных электронов для графена.** Ранее показано, что электрическая проводимость графена или углеродной нанотрубки связана с  $\pi$  электроном на  $2p_z$  орбитали. Решим уравнение Шредингера для данного электрона и найдем дисперсионное соотношение для энергии графена.

Электрон, двигающийся в периодическом потенциале  $V(\vec{r})$ , описывается уравнением Шредингера

$$\left[ -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi_i(\vec{r}) = E_i \psi_i(\vec{r}), \quad (5)$$

где  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка (постоянная Дирака);  $\psi_i(\vec{r})$  — волновая функция;  $E_i$  — энергия;  $m$  — масса электрона.

Для решения уравнения Шредингера можно использовать метод сильно связанных электронов [18]. В данном методе электронная волновая функция аппроксимируется линейной комбинацией функций Блоха [12].

$$\psi_i(\vec{k}, \vec{r}) = \sum_{j=1}^n C_{ij}(\vec{k}) \Phi_j(\vec{k}, \vec{r}), \quad (6)$$

где  $\vec{k}$  — волновой вектор;  $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$  — является  $j$ -й функцией Блоха;  $C_{ij}(\vec{k})$  — весовые коэффициенты.

Функция Блоха  $\Phi_j(\vec{k}, \vec{r})$  определяется как комбинация  $j$ -х атомных волновых функции  $\varphi_j(\vec{r})$  в элементарных ячейках на различных атомах решетки. Предположим, что существует  $N$  элементарных ячеек и в решетке в каждой ячейке имеется  $n$  волновых функций. Тогда получаем  $n$  функций Блоха с  $j$ -й функцией Блоха в следующем виде:

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \phi_j(\vec{r} - \vec{R}_l), \quad (7)$$

где  $\vec{R}_l$  — положение  $l$ -го атома.

Для нахождения весовых коэффициентов  $C_{ij}(\vec{k})$  значения доступной энергии  $E_i(\vec{k})$  следует минимизировать исходя из представления

$$E_i(\vec{k}) = \frac{\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle}{\langle \psi_i | \psi_i \rangle} = \frac{\int \psi_i H \psi_i d\vec{r}}{\int \psi_i \psi_i d\vec{r}}, \quad (8)$$

где  $H$  — гамильтониан.

Для нахождения экстремума функционала (8) подставим выражение (6) в (8), и затем продифференцируем результат по отношению к  $C_{ij}(\vec{k})$ . Полученное выражение приравняем к нулю. В итоге получим

$$[H]C_i = E_i(\vec{k})[S]C_i, \quad (9)$$

где  $C_i$  — вектор  $n$  коэффициентов;  $[H]$  и  $[S]$  — матрицы, определенные как

$$\begin{aligned} H_{ij} &= \langle \psi_i | H | \psi_j \rangle, \\ S_{ij} &= \langle \psi_i | \psi_j \rangle. \end{aligned} \quad (10)$$

При нахождении собственного значения уравнения (9) получим необходимое дисперсионное соотношение для энергии. Следует отметить, что собственные значения  $E_i(\vec{k})$  являются периодическими функциями обратной решетки  $(k_x, k_y, k_z)$ . Это означает, что дискретное соотношение для энергии может быть описано в пределах первой зоны Бриллюэна.

Для проведения вычислений с помощью метода сильно связанных электронов необходимо [12]:

1. Задать элементарную ячейку, базисные векторы  $(\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3)$  и координаты атомов в элементарной ячейке.
2. Выбрать для рассмотрения в вычислениях  $n$  атомных орбиталей.
3. Обозначить зону Бриллюэна и векторы  $(\vec{A}_1, \vec{A}_2, \vec{A}_3)$  обратной решетки.
4. Вычислить элементы матриц  $[H]$  и  $[S]$ .
5. Найти собственное значение и получить дисперсионное соотношение для энергии графена при использовании выбранных ранее атомных орбиталей.

Найдем дисперсионное соотношение для энергии графена, используя описанный алгоритм.

Будем рассматривать слой графена как решетку, сформированную из элементарных ячеек, имеющих два атома («А» и «Б») (рис. 4), повторяющихся в направлении векторов  $\vec{a}_1$  и  $\vec{a}_2$ .

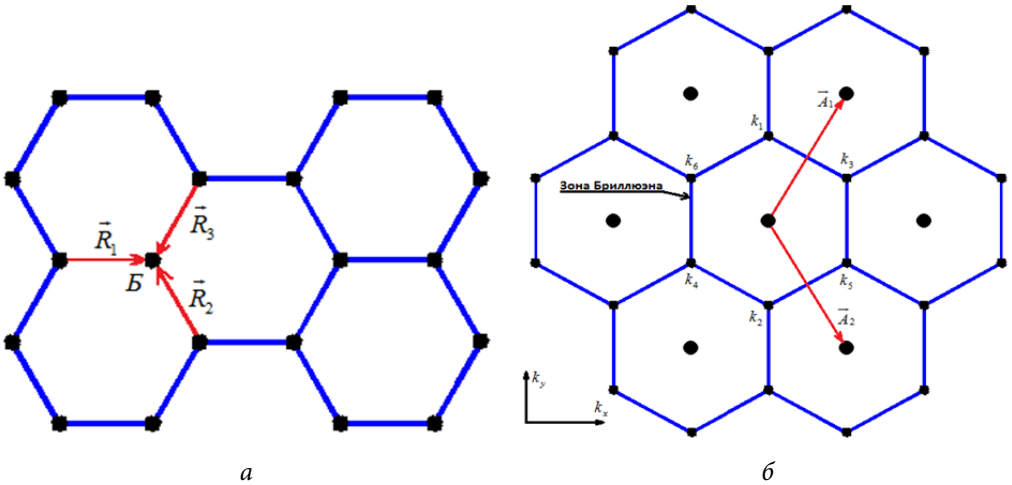


Рис. 4. Прямая (а) и обратная (б) решетки:

$\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3$  — радиус-векторы трех ближайших «Б»-атомов;  $k_1, k_2, k_3, k_4, k_5, k_6$  — точки Дирака, ограничивающие зону Бриллюэна;  $\vec{A}_1$  и  $\vec{A}_2$  — базисные векторы обратной решетки

Электрические свойства графена зависят только от  $2p_z$  электронов, поэтому при осуществлении расчета учтены два  $\pi$  электрона в элементарной ячейке (на каждый атом по электрону). Именно эти атомные орбитали были использованы при построении функций Блоха.

Для нахождения обратной решетки и первой зоны Бриллюэна графена была использована схема Датта [19], где векторы обратной решетки в плоскости  $k_x - k_y$  определены выражением

$$\vec{K} = M' \vec{A}_1 + N' \vec{A}_2. \tag{11}$$

Здесь  $M', N'$  — целые числа;  $\vec{A}_1$  и  $\vec{A}_2$  — базисные векторы обратной решетки, которые определены выражениями

$$\begin{aligned} \vec{A}_1 &= \frac{2\pi}{3a_0} \vec{i} + \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0} \vec{j}; \\ \vec{A}_2 &= \frac{2\pi}{3a_0} \vec{i} - \frac{2\pi}{\sqrt{3}a_0} \vec{j}, \end{aligned} \tag{12}$$

где  $\vec{i}, \vec{j}$  — орты осей  $k_x, k_y$  обратной решетки.

Данные базисные векторы были использованы для построения обратной решетки. Первая зона Бриллюэна была получена обычным делением на два расстояния от  $k = 0$  до соседних узлов обратной решетки (см. рис. 4).

Точки, ограничивающие зону Бриллюэна, называют точками Дирака, поскольку вблизи них собственное значение (9) приобретает линейную зависимость. Координаты этих точек имеют следующие значения:

$$\begin{aligned}
 k_1 &= k_1 \left( 0, \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right); \\
 k_2 &= k_2 \left( 0, -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right); \\
 k_3 &= k_3 \left( \frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right); \\
 k_4 &= k_4 \left( -\frac{2\pi}{3a_0}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right); \\
 k_5 &= k_5 \left( \frac{2\pi}{3a_0}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right); \\
 k_6 &= k_6 \left( -\frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0} \right).
 \end{aligned}$$

Для вычисления элементов матриц  $[H]$  и  $[S]$  были использованы две функции Блоха, поэтому полученные матрицы являются квадратными матрицами второго порядка. Функции Блоха имеют вид

$$\Phi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \varphi_j(\vec{r} - \vec{R}_l), \tag{13}$$

где  $\varphi_j(\vec{r})$  — волновая функция электронов в «А» и «Б» атомах, соответствующая состоянию  $2p_z$  ( $j=1, 2$ ).

Элемент  $H_{11}$  матрицы может быть найден путем подстановки (13) (при  $j=1$ ) в выражение (6), тогда

$$\begin{aligned}
 H_{11} &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sum_{o=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_o)} \langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}_o) | H | \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}_l) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{l=o=1}^N \varepsilon_{2p_z} + \\
 &+ \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sum_{o \neq l}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_o)} \langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}_o) | H | \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}_l) \rangle = \varepsilon_{2p_z}.
 \end{aligned} \tag{14}$$

В выражении (14) максимально возможный максимальный вклад в значение матричного элемента  $H_{11}$  дают слагаемые, удовлетворяющие условию. Оно не включает потенциал кристалла в гамильтониане, описывая энергию  $2p_z$  орбитали  $(\varepsilon_{2p_z})$ . Другими слагаемыми выражения (14) (если разница в расстоя-



нии между двумя атомами «А» больше или приблизительно равна  $\sqrt{3}a_0$ ) можно пренебречь [12]. Таким же образом может быть определен элемент матрицы  $H_{22}$ . Расчет показывает, что  $H_{22} = H_{11} = \varepsilon_{2p_z}$ .

Для определения матричных элементов  $H_{12}$  и  $H_{21}$  были учтены вклады в гамильтониан только трех ближайших «Б» атомов (относительно «А»). Вклад атомов, находящихся на больших расстояниях, считается исчезающе малым [12]. Используем описанное ранее выражение, чтобы получить  $H_{12}$ .

$$\begin{aligned}
 H_{12} &= \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \sum_{o=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_l - \vec{R}_o)} \left\langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}_o) \left| H \right| \varphi_2(\vec{r} - \vec{R}_l) \right\rangle = \\
 &= \sum_{i=1}^3 \left\langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}) \left| H \right| \varphi_2(\vec{r} - (\vec{R} + \vec{R}_i)) \right\rangle e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} = t \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i},
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

где

$$t = \left\langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}) \left| H \right| \varphi_2(\vec{r} - \vec{R}) \right\rangle.
 \tag{16}$$

Здесь  $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{R}_3$  — радиус-векторы трех ближайших «Б»-атомов (см. рис. 4).

Для нахождения элементов матрицы  $[S]$  был использован тот же метод:

$$\begin{aligned}
 S_{11} &= S_{22} = 1; \\
 S_{12} &= S_{21} = s \sum_{i=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i},
 \end{aligned}
 \tag{17}$$

где

$$s = \left\langle \varphi_1(\vec{r} - \vec{R}) \left| \varphi_2(\vec{r} - \vec{R}) \right. \right\rangle.
 \tag{18}$$

Решая уравнение (9) с полученными матрицами  $[H]$  и  $[S]$ , запишем

$$E(\vec{k}) = \frac{\varepsilon_{2p_z} \pm tw(\vec{k})}{1 \pm sw(\vec{k})},
 \tag{19}$$

где

$$w(\vec{k}) = \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3k_x a_0}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}k_y a_0}{2}\right)}.$$

Для упрощения вычислений  $s$  можно приравнять к нулю [12]. Это связано с тем, что при дальнейших вычислениях достаточно использовать только зонную проводимость  $s$  имеет большое влияние на дисперсионное соотношение для энергии валентной зоны, но оказывает минимальное воздействие на зону проводимости. Таким образом, мы работаем только в зоне проводимости и дисперсионное соотношение для энергии графена приобретает вид

$$E(\vec{k}) = \varepsilon_{2p_z} \pm t w(\vec{k}). \quad (20)$$

Результат численного расчета (20) при условии  $\varepsilon_{2p_z} = 0$  представлен на рис. 5. Значения  $E(\vec{k}) > \varepsilon_{2p_z}$  и  $E(\vec{k}) < \varepsilon_{2p_z}$  — зона проводимости и валентная зона графена, соответственно. Точки соприкосновения зон ( $E(\vec{k}) = \varepsilon_{2p_z}$ ) также называют  $k$ -точки. Вблизи данных точек наблюдается линейная зависимость дисперсионного соотношения для энергии графена от волнового вектора, поэтому уравнение (20) при условии  $\varepsilon_{2p_z} = 0$  еще называют уравнением Дирака для графена.

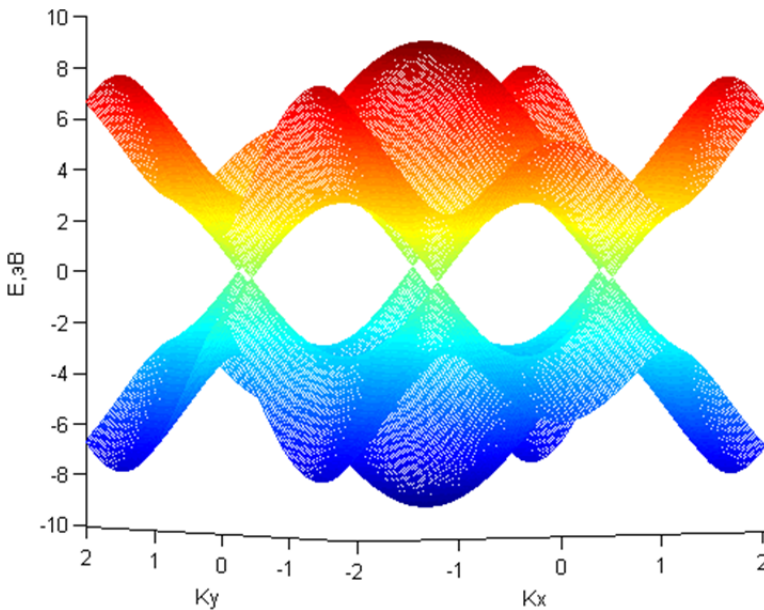


Рис. 5. Дисперсионное соотношение для энергии графена ( $\varepsilon_{2p_z} = 0$ )

Результат численного расчета (20) представляет собой классический вид дисперсионного соотношения для энергии графена и является основой для дальнейшего моделирования и изучения зонной структуры любых наноструктур на основе графена.

Следует отметить, что данный результат численного моделирования при помощи метода сильно связанных электронов будет носить «идеализированный» характер. Одна из причин в том, что в процессе моделирования произведена аппроксимация, где учитывалась только  $\pi$ -связь, а возможное влияние  $\sigma$ -связей было полностью исключено. Другая, и более важная причина, заключается в том, что из расчета полностью исключены возможные деформации или дефекты наноструктуры, отсюда и «идеализированный» результат. Однако это не означает, что данным методом стоит пренебречь, поскольку он является идеальным инструментом для быстрой оценки возможных электронных свойств наноструктур на основе графена.

## Литература

1. *Radushkevich L.V., Lukyanovich V.M.* On the structure of carbon formed by the thermal decomposition of carbon monoxide (CO) to the contact with iron // *Russ. J. Phys. Chem.* 1952. Vol. 26. P. 88.
2. *Iijima S.* Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. 1991. Vol. 354. No. 6348. P. 56–58. URL: <https://www.nature.com/nature/journal/v354/n6348/pdf/354056a0.pdf>  
DOI: 10.1038/354056a0
3. *Pop E., Mann D.A., Goodson K.E., Dai H.* Electrical and thermal transport in metallic single-wall carbon nanotubes on insulating substrates // *Journal of Applied Physics*. 2007. Vol. 101. No. 9. P. 093710. URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2717855> DOI: 10.1063/1.2717855
4. *Kuroda M.A., Leburton J.P.* Joule heating induced negative differential resistance in free-standing metallic carbon nanotubes // *Applied Physics Letters*. 2006. Vol. 89. No. 10. P. 103102.  
URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2345244> DOI: 10.1063/1.2345244
5. *Impact of tunnel-barrier strength on magnetoresistance in carbon nanotubes / C. Morgan, M. Misiorny, D. Metten, S. Heedt, T. Schäpers, C.M. Schneider, C. Meyer* // *Physical Review Applied*. 2016. Vol. 5. No. 5. P. 054010.  
URL: <https://journals.aps.org/prapplied/abstract/10.1103/PhysRevApplied.5.054010>  
DOI: 10.1103/PhysRevApplied.5.054010
6. *Biesheuvel P.M., Bazant M.Z.* Analysis of ionic conductance of carbon nanotubes // *Physical Review E*. 2016. Vol. 94. No. 5. P. 050601.  
URL: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.94.050601>  
DOI: 10.1103/PhysRevE.94.050601
7. *Morimoto T., Ichida M., Ikemoto Yu., Toshiya O.* Temperature dependence of plasmon resonance in single-walled carbon nanotubes // *Physical Review B*. 2016. Vol. 93. No. 19. P. 195409. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.93.195409>  
DOI: 10.1103/PhysRevB.93.195409
8. *Mylvaganam K., Zhang L.C.* Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes // *Carbon*. 2004. Vol. 42. No. 10. P. 2025–2032. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000862230400260X>  
DOI: 10.1016/j.carbon.2004.04.004
9. *Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M.* Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes // *Nature*. 1996. Vol. 381. No. 6584. P. 678–680.  
URL: <https://www.nature.com/nature/journal/v381/n6584/abs/381678a0.html>  
DOI: 10.1038/381678a0
10. *Montes E., Schwingenschlögl U.* Nanotubes based on monolayer blue phosphorus // *Physical Review B*. 2016. Vol. 94. No. 3. P. 035412.  
URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.94.035412>  
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.035412
11. *Scattering strength of potassium on a carbon nanotube with known chirality / R. Tsuchikawa, D. Heligman, B.T. Blue, Z.Y. Zhang, A. Ahmadi, E.R. Mucciolo, J. Hone, M. Ishigami* // *Physical Review B*. 2016. Vol. 94. No. 4. P. 045408.  
URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.94.045408>  
DOI: 10.1103/PhysRevB.94.045408
12. *Saito R.* Physical properties of carbon nanotubes. London: Imperial college press. 1998. 272 p.
13. *Current saturation and electrical breakdown in multiwalled carbon nanotubes / P.G. Collins, M. Hersam, M. Arnold, R. Martel, Ph. Avouris* // *Physical Review Letters*. 2001. Vol. 86. No. 14.

- P. 3128. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.86.3128>  
DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.3128
14. *Carbon* nanotubes in interconnect applications / F. Kreupl, A.P. Graham, G.S. Duesberg, W. Steinhögl, M. Liebau, E. Unger, W. Hönlein // *Microelectronic Engineering*. 2002. Vol. 64. No. 1-4. P. 399–408. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167931702008146>  
DOI: 10.1016/S0167-9317(02)00814-6
15. *Towards* the integration of carbon nanotubes in Microelectronics / A.P. Graham, G.S. Duesberg, R. Seidel, M. Liebau, E. Unger, F. Kreupl, W. Hönlein // *Diamond & Related Materials*. 2004. Vol. 13. No. 4-8. P. 1296–1300.  
URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925963503004576>  
DOI: 10.1016/j.diamond.2003.10.080
16. *White C.T.*, Robertson D.H., Mintmire J.W. Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules // *Physical Review B*. 1993. Vol. 47. No. 9. P. 5485.  
URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.47.5485>  
DOI: 10.1103/PhysRevB.47.5485
17. *Agrawal P.M.*, *Sudalayandia B.S.*, *Raff L.M.*, *Komanduria R.* Molecular dynamics (MD) simulations of the dependence of C–C bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes (SWCNT) // *Computational Materials Science*. 2008. Vol. 41. No. 4. P. 450–456. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025607001322>  
DOI: 10.1016/j.commatsci.2007.05.001
18. *Ashcroft N.W.*, *Mermin N.D.* *Solid state physics*. Philadelphia: Saunders College Publishing. 1976. 272 p.
19. *Datta S.* *Quantum transport: Atom to transistor*. New York: Cambridge University Press. 2013. 417 p.

**Мосин Михаил Александрович** — студент кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

**Научный руководитель** — О.С. Еркович, канд. физ.-мат.наук, доцент кафедры «Физика», МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Российская Федерация.

## USING THE TIGHT-BINDING MODEL TO DERIVE A DISPERSION RELATION FOR GRAPHENE ENERGY

M.A. Mosin

med-aid@yandex.ru

Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation

### Abstract

We solve the problem of accounting for varying graphene-based nanostructure parameters by means of conducting numerical simulations. To solve the Schrödinger equation, we used the tight-binding model as an alternative to molecular dynamics simulation. We describe implementing this method for the case of  $\pi$  electrons in a graphene layer. We derive a dispersion relation for graphene energy. It is possible to use the results presented to determine the band structure of single-walled carbon nanotubes and to study their electronic properties

### Keywords

Carbon nanotubes, graphene, graphene conductivity, tight-binding model, dispersion relation for energy, Bloch functions, Brillouin zones, Dirac points

© Bauman Moscow State Technical University, 2017

### References

- [1] Radushkevich L.V., Lukyanovich V.M. On the structure of carbon formed by the thermal decomposition of carbon monoxide (CO) to the contact with iron. *Russ. J. Phys. Chem.*, 1952, vol. 26, pp. 88.
- [2] Iijima S. Helical microtubules of graphitic carbon // *Nature*. 1991, vol. 354, no. 6348, pp. 56–58. URL: <https://www.nature.com/nature/journal/v354/n6348/pdf/354056a0.pdf> DOI: 10.1038/354056a0
- [3] Pop E., Mann D.A., Goodson K.E., Dai H. Electrical and thermal transport in metallic single-wall carbon nanotubes on insulating substrates. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 101, no. 9, pp. 093710. URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2717855> DOI: 10.1063/1.2717855
- [4] Kuroda M.A., Leburton J.P. Joule heating induced negative differential resistance in free-standing metallic carbon nanotubes. *Applied Physics Letters*, 2006, vol. 89, no. 10, pp. 103102. URL: <http://aip.scitation.org/doi/10.1063/1.2345244> DOI: 10.1063/1.2345244
- [5] Morgan C., Misiorny M., Metten D., Heedt S., Schäpers T., Schneider C.M., Meyer C. Impact of tunnel-barrier strength on magnetoresistance in carbon nanotubes. *Physical Review Applied*, 2016, vol. 5, no. 5, pp. 054010. URL: <https://journals.aps.org/prapplied/abstract/10.1103/PhysRevApplied.5.054010> DOI: 10.1103/PhysRevApplied.5.054010
- [6] Biesheuvel P.M., Bazant M.Z. Analysis of ionic conductance of carbon nanotubes. *Physical Review E*, 2016, vol. 94, no. 5, pp. 050601. URL: <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.94.050601> DOI: 10.1103/PhysRevE.94.050601
- [7] Morimoto T., Ichida M., Ikemoto Yu., Toshiya O. Temperature dependence of plasmon resonance in single-walled carbon nanotubes. *Physical Review B*, 2016, vol. 93, no. 19, pp. 195409. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.93.195409> DOI: 10.1103/PhysRevB.93.195409

- [8] Mylvaganam K., Zhang L.C. Important issues in a molecular dynamics simulation for characterising the mechanical properties of carbon nanotubes. *Carbon*, 2004, vol. 42, no. 10, pp. 2025–2032. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S000862230400260X> DOI: 10.1016/j.carbon.2004.04.004
- [9] Treacy M.M.J., Ebbesen T.W., Gibson J.M. Exceptionally high Young's modulus observed for individual carbon nanotubes. *Nature*, 1996, vol. 381, no. 6584, pp. 678–680. URL: <https://www.nature.com/nature/journal/v381/n6584/abs/381678a0.html> DOI: 10.1038/381678a0
- [10] Montes E., Schwingenschlögl U. Nanotubes based on monolayer blue phosphorus. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 3, pp. 035412. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.94.035412> DOI: 10.1103/PhysRevB.94.035412
- [11] Tsuchikawa R., Heligman D., Blue B.T., Zhang Z.Y., Ahmadi A., Mucciolo E.R., Hone J., Ishigami M. Scattering strength of potassium on a carbon nanotube with known chirality. *Physical Review B*, 2016, vol. 94, no. 4, pp. 045408. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.94.045408> DOI: 10.1103/PhysRevB.94.045408
- [12] Saito R. Physical properties of carbon nanotubes. London, Imperial college press. 1998. 272 p.
- [13] Collins P.G., Hersam M., Arnold M., Martel R., Avouris Ph. Current saturation and electrical breakdown in multiwalled carbon nanotubes. *Physical Review Letters*, 2001, vol. 86, no. 14, pp. 3128. URL: <https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.86.3128> DOI: 10.1103/PhysRevLett.86.3128
- [14] Kreupl F., Graham A.P., Duesberg G.S., Steinhögl W., Liebau M., Unger E., Hönlein W. Carbon nanotubes in interconnect applications. *Microelectronic Engineering*, 2002, vol. 64, no. 1-4, pp. 399–408. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167931702008146> DOI: 10.1016/S0167-9317(02)00814-6
- [15] Graham A.P., Duesberg G.S., Seidel R., Liebau M., Unger E., Kreupl F., Hönlein W. Towards the integration of carbon nanotubes in microelectronics. *Diamond & Related Materials*, 2004, vol. 13, no. 4-8, pp. 1296–1300. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0925963503004576> DOI: 10.1016/j.diamond.2003.10.080
- [16] White C.T., Robertson D.H., Mintmire J.W. Helical and rotational symmetries of nanoscale graphitic tubules. *Physical Review B*, 1993, vol. 47, no. 9, pp. 5485. URL: <https://journals.aps.org/prb/abstract/10.1103/PhysRevB.47.5485> DOI: 10.1103/PhysRevB.47.5485
- [17] Agrawal P.M., Sudalayandia B.S., Raff L.M., Komanduria R. Molecular dynamics (MD) simulations of the dependence of C–C bond lengths and bond angles on the tensile strain in single-wall carbon nanotubes (SWCNT). *Computational Materials Science*, 2008, vol. 41, no. 4, pp. 450–456. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025607001322> DOI: 10.1016/j.commat.2007.05.001
- [18] Ashcroft N.W., Mermin N.D. Solid state physics. Philadelphia, Saunders College Publishing. 1976. 272 p.
- [19] Datta S. Quantum transport: Atom to transistor. New York, Cambridge University Press. 2013. 417 p.

**Mosin M.A.** — student of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.

**Scientific advisor** — O.S. Erkovich, Cand. Sc. (Phys.-Math.), Assoc. Professor of Physics Department, Bauman Moscow State Technical University, Moscow, Russian Federation.