



ФИЗИКА И АСТРОНОМИЯ

DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcmt.jvolsu.2025.4.5>



УДК 538.915+975; 544.22.022.343; 544.225.22+25 Дата поступления статьи: 10.10.2025
ББК 24.5 Дата принятия статьи: 21.10.2025

ЗОННАЯ СТРУКТУРА НАПРЯЖЕННО-ДЕФОРМИРОВАННОГО ГРАФЕНА

Александр Сергеевич Бондарь

Аспирант кафедры теоретической физики и волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
sahhabond@gmail.com
<https://orcid.org/0009-0001-3214-3175>
г. Волгоград, проспект университетский, д. 100

Ольга Сергеевна Лебедева

Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры теоретической физики и
волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
lebedeva_os@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3502-9570>
г. Волгоград, проспект университетский, д. 100

Николай Геннадьевич Лебедев

Доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической физики и
волновых процессов,
Волгоградский государственный университет
nikolay.lebedev@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-4400-8982>
г. Волгоград, проспект университетский, д. 100

Аннотация. Идеальный графен проявляет проводниковые свойства из-за отсутствия в спектре электрона запрещенной зоны. Ряд экспериментальных работ показывает возможность получения запрещенной зоны графена с помощью помещения его на различные подложки. Графен на подложке может испытывать разного рода деформации структуры, что влияет на электронную структуру исследуемого материала. В данной работе предложен подход к учету влияния полей упругих и пластических деформаций на электронное строение графеноподобных структур в рамках модели сильной связи. Новизна предложенной модели заключается в учете неоднородности прыжкового интеграла между ближайшими соседями атомами. Приведен метод оценки основного энергетического параметра модели – матричного элемента перехода между ближайшими атомами углерода (прыжкового интеграла), в области локальной деформации структуры графена, вызванной петлевой дислокацией. Предложена и проанализирована зависимость энергетического спектра электрона от величины одноосных и сдвиговых компонент тензора деформаций. Анализ модели обнаружил эффект движения и слияния конусов Дирака. В работе показано, что только после слияния происходит открытие запрещенной зоны и дальнейшее ее увеличение при сдвиговых деформациях. При наличии только диагональных компонент тензора деформации слияния точек Дирака не происходит, и запрещенная зона не появляется. На основе построенной модели можно предсказать необходимые значения деформаций для получения устойчивой запрещенной зоны в графене, а, следовательно, его полупроводниковых свойств. Так же полученная модель показывает возможность управления полупроводниковыми свойствами.

Ключевые слова: метод сильной связи, точки Дирака, пластические деформации, виртуальные дислокации.

Введение

В современной электронике низкоразмерные структуры семейства графена, или их аналоги, такие как германен [1], рассматриваются как возможная замена кремния в элементной базе. Наиболее вероятное применение таких структур - в качестве электродов для транзисторов. Так, графен с полупроводниковыми свойствами мог бы стать "базой" в подобных устройствах. Если рассматривать графен, то он не является полупроводником, напротив, это хороший проводник с удельной проводимостью, сравнимой с медью. Отсутствие полупроводниковых свойств у графена связано с практически полным отсутствием так называемой запрещенной зоны ($E_g < 0.05$ мэВ) в одноэлектронном спектре [2].

Теоретики и экспериментаторы давно пытаются превратить графен в полноценный полупроводник. Подходов к решению вышеописанной проблемы на данный момент придумано достаточно много, например, введение различных дефектов и примесей, помещение графена на подложку из различных металлов. Однако, как правило, примеси распределяются по двумерному материалу крайне неоднородно. Из-за этого подобные структуры невозможно использовать для производства элементов электроники без чрезвычайно высоких затрат [2].

Теоретические результаты исследования зависимости запрещенной зоны от величины одноосных деформаций растяжения (сжатия) и сдвига, представленные в обзоре [2], сильно разнятся друг от друга. Экспериментаторы же утверждают, что деформациями структуры невозможно открыть щель в спектре графена.

Однако в работах [3; 4] проведено исследование влияния размера петлевых дислокаций на электронные свойства и подрешеточный феримагнетизм в графене с помощью методов теории функционала плотности. Показано, что графен и нижележащий слой золота с петлевыми дислокациями различного размера характеризуются феримагнитной упорядоченностью внутри атомных слоев. Кроме того, наличие дополнительных адатомов золота под графеном усиливает индуцированное спин-орбитальное взаимодействие в графене и открывает энергетическую щель.

Приведенная выше статья [4] доказывает возможность появления запрещенной зоны у графена на подложке. Предполагается, что создания пластических деформаций различными механизмами будут приводить к появлению виртуальных петлевых дислокаций в графене [5]. При достаточно больших петлевых дислокациях величина запрещенной зоны может достичь значений сравнимых с современными полупроводниковыми материалами, что позволит использовать подобные структуры в электронике.

Исследование влияния пластических деформаций в графене на его электронные и проводящие (тензорезистивные) свойства проведено в работе [6]. Авторами показано, что наличие слабых полей неупругих деформаций приводит к резонансным эффектам, сильно изменяющим константу пьезорезистивности.

Целью настоящей работы является изучить влияние полей пластических деформаций на электронное строение двумерных структур семейства графена и выявить возможные значения деформаций для получения устойчивых полупроводниковых свойств. В перспективе результаты работы позволят делать предсказание параметров петлевых дислокаций для создания устойчивых полупроводниковых свойств сравнимых с современными материалами элементной базы электроники.

Теоретическая модель графена в напряженно-деформированном состоянии

Рассмотрим вывод выражения для зонной структуры деформированного двумерного графена, представленный в работе [7].

Геометрическая модель графена строится на основе двумерного гексагонального слоя с двумя атомами в элементарной ячейке (ЭЯ) и векторами основных трансляций $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$ и $\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$ ($a_1 = a_2 = a$), $a = \sqrt{3}R_0$ – постоянная решетки, $R_0 = 1.42\text{\AA}$ – межатомное расстояние (рис. 1).

Основные особенности зонной структуры графена описываются в рамках метода сильной связи для π -электронной подсистемы. Гамильтониан гексагонального графена в рамках метода вторичного квантования можно представить в виде:

$$H = \sum_{j\Delta\sigma} t_\Delta a_{j\sigma}^\dagger a_{j+\Delta\sigma}, \quad (1)$$

где t_Δ – интеграл перескока электрона между соседними атомами; $a_{j\sigma}^\dagger a_{j+\Delta\sigma}$ – операторы Ферми рождения и уничтожения электрона на узле с координатами r_j и спином σ на узлах решетки, символ Δ – индекс векторов расстояния между соседними атомами углерода.

Закон дисперсии электронов в кристалле получается диагонализацией гамильтониана (1) после пространственного Фурье-преобразования:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\left(\sum_{\Delta} t_{\Delta} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \right) \left(\sum_{\Delta} t_{\Delta} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\Delta}} \right)}, \quad (2)$$

где \mathbf{k} – волновой вектор, задаваемый в пределах зоны Бриллюена графена.

При деформации межатомное расстояние в кристаллите изменяется вследствие чего закон дисперсии для энергии электронов может измениться. В общем случае вектор межатомных расстояний \mathbf{R}_{Δ} определяется тензором деформаций по следующей формуле:

$$\mathbf{R}_{\Delta} = (\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}}) \mathbf{R}_{0\Delta}, \quad (3)$$

где \mathbf{R}_0 – начальные вектора между соседними атомами; $\hat{\mathbf{u}}$ – тензор деформаций, $\hat{\mathbf{I}}$ – единичный тензор.

В работе рассматривается влияние соседних атомов на один из узлов кристаллической решетки графена в рамках построенной модели. В общем случае тензор деформаций на данный узел будет складываться из упругих и пластических деформаций, который можно записать в следующем виде [8]:

$$\hat{\mathbf{u}} = \hat{\mathbf{u}}_e + \hat{\mathbf{u}}_p, \quad (4)$$

где $\hat{\mathbf{u}}_e$ – тензор упругих деформаций; $\hat{\mathbf{u}}_p$ – тензор пластических деформаций.

Прыжковые интегралы t в общем случае изменяются неоднородно, что можно учесть их разложением в ряд по тензору деформаций как в работе [9] или получить зависимость прыжкового интеграла от межатомного расстояния в графене.

Прыжковый интеграл

Прыжковый интеграл известен из литературы для недеформированного состояния графена и составляет примерно 2.7 эВ [10]. Для получения зависимости энергетической щели от деформаций необходимо учитывать также изменения прыжкового интеграла от тензора деформаций в графене. Для данной цели в работе предложен метод получения функции прыжкового интеграла от межатомного расстояния.

Рассмотрим модель одночастичного приближения для расчета прыжкового интеграла (рис. 2).

Если обозначить в качестве $\Psi(\mathbf{r})$ и $\Psi(\mathbf{r}_1)$ волновые функции электрона первого и второго узла, то в одночастичном приближении прыжковый интеграл t будет иметь вид:

$$t = - \int_{+\infty}^{-\infty} \Psi(\mathbf{r}) \left(\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{kZe^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \frac{kZe^2}{r} \right) \Psi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) d\mathbf{r}, \quad (5)$$

где \hbar - приведенная постоянная планка, \mathbf{r}_0 – радиус-вектор узла решетки, \mathbf{r} – радиус-вектор рассматриваемой точки пространства, Z – эффективный заряд ядра атома углерода.

Для оценок интеграла перескока волновая функция выбирается в виде $2p_z$ орбиталей водородоподобного атома:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\sqrt{2}\pi} \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{5}{2}} r e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \cos(\theta), \quad (6)$$

где a_0 - радиус первой боровской орбиты.

Полученные значения прыжкового интеграла были нормированы на «недеформированное» литературное значение, приведенное в начале статьи. Зависимости интеграла от относительной деформации длины межатомной связи в плоскости графенового листа и перпендикулярном (off-plan) направлении представлены на рисунках 3 и 4.

В силу симметрии решетки графена, график деформации по оси u для прыжкового интеграла выглядит аналогичным образом, как и для x , поэтому он не представлен.

Интерполируя полученные значения экспоненциальной функцией, можно получить следующие выражения, которые используются в дальнейших расчетах зонной структуры напряженно-деформированного графена:

$$t = 105.67 \cdot e^{-2.579R}, \quad (7)$$

$$t_z = 145.1 \cdot 10^6 \cdot e^{-12.532R}, \quad (8)$$

где t_z прыжковый интеграл учитывающий случай выхода атома углерода из плоскости графена.

Ранее в статье [6] авторы приводили аналитическое выражение для прыжкового интеграла, полученное квантовохимическими расчетами в рамках теории функционала плотности и представленное ниже:

$$t = 47.42 \cdot e^{-2.0162R}, \quad (9)$$

Однако данное выражение получено только для плоскости графена, что не позволяет описать случай, когда графен деформируется с выходом атомов из плоскости решетки. Так же как упоминалось ранее теоретические расчеты сильно разнятся в оценки запрещенных зон. И как видно из уравнения (2) эти различия сильно связаны с прыжковым интегралом. Поэтому важно найти метод, который будет давать наиболее близкие значения прыжкового интеграла к реальным. Сравнения двух аналитических кривых по формулам (7), (9) представлены ниже на рис. 5, так же на рис. 6

Заменив в формуле (7) R по формуле (3) на R_i , индекс $i=1,2,3$ номерует ближайших соседей, можно получить зависимость прыжкового интеграла от тензора деформации:

$$t_i = 105.67 \cdot e^{-2.579|(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})\mathbf{R}_{0i}|}. \quad (10)$$

Модель электронного строения напряженно-деформированного графена

Задавшись вышеописанной геометрической моделью (рис. 1) и используя формулы (2), (3), (10), получено аналитическое выражение для зонной структуры деформированного двумерного графена с учетом неоднородности прыжкового интеграла:

$$E(\mathbf{k}) = \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + 2t_1t_2 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{01} - \mathbf{R}_{02})) + \\ + 2t_1t_3 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{01} - \mathbf{R}_{03})) + \\ + 2t_2t_3 \cos(\mathbf{k}(\hat{\mathbf{I}} + \hat{\mathbf{u}})(\mathbf{R}_{02} - \mathbf{R}_{03}))}. \quad (11)$$

Спектр недеформированного графена в окрестности одной из дираковских точек вблизи уровня Ферми принимает конусообразный вид с нулевой энергетической зоной (рис. 6).

В результате деформации кристаллической решетки изменяется зона Бриллюэна. Следствием этого является сдвиг точек Дирака в новое положение (рис. 7).

При одноосных растяжениях запрещенная щель в точках Дирака не появляется вплоть до значений относительной деформации $u_{xx} = 0.2$. Кроме того, изменяется наклон дисперсионных кривых, что означает изменение плотности состояний в прифермьевской области энергий.

При двухосных сдвиговых деформациях также наблюдается отсутствие энергетической щели до значений $u_{xy} \approx 0.144$ после чего ширина запрещенной зоны растет практически линейно (рис. 8).

Смешанная деформация растяжения и сдвига создает энергетическую зону вблизи уровня Ферми при меньших деформациях по сравнению с чистым сдвигом или растяжением. Зависимость энергии запрещенной зоны от деформаций растяжения и сдвига получается весьма сложной. Увеличение одной из деформаций может привести как к увеличению, так и к уменьшению щели в спектре. Регулируя растяжения и сдвиг, можно добиться получения значения энергии запрещенной зоны, необходимой для решения конкретных практических задач. Ниже приведены графики на рисунке 9 зависимости энергетической щели от сдвига для некоторых значений деформации растяжения.

Из анализа графиков видно, что изменения растяжения приводят не только к сдвигу пороговых деформаций, при которых появляются щель, но и к увеличению значения энергетической щели при аналогичных сдвиговых деформациях.

Спектр деформированного и недеформированного графена на всей зоне Бриллюэна приведен ниже на рисунке 10.

Проанализировав график электронного спектра, можно заметить, что некоторые точки Дирака сливаются. Проследив динамику слияния точек Дирака, можно заметить, что энергетическая щель не появляется пока не завершится слияния точек. Этот эффект был ранее описан в статье [11], где рассматривалась модель неоднородного прыжкового интеграла, и анализировались особенности двумерной энергетической поверхности.

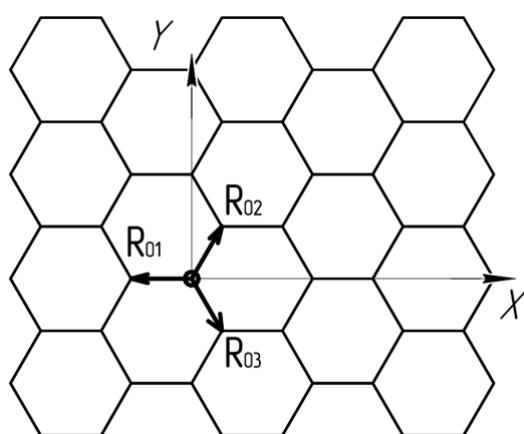


Рис. 1. Геометрическая модель графена

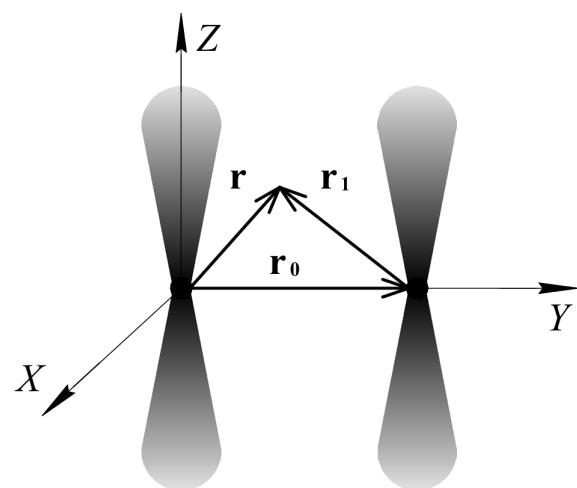


Рис. 2. Схематическое изображение $2p_z$ орбиталей соседних атомов углерода

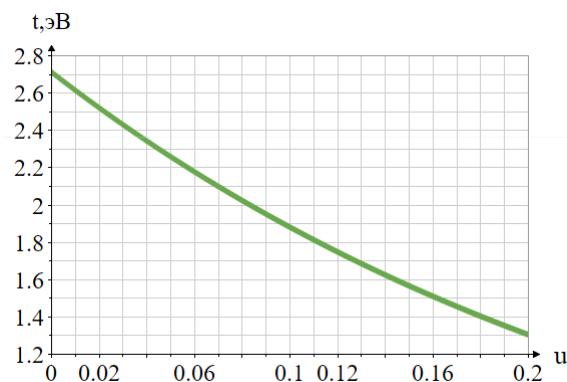


Рис. 3. График зависимость прыжкового интеграла от величины относительной деформации межатомной связи в плоскости графена

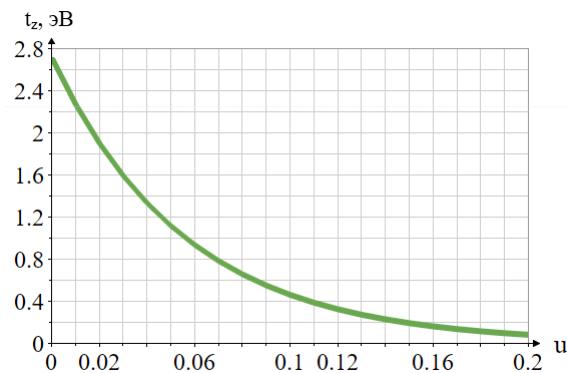


Рис. 4. График зависимость прыжкового интеграла от величины относительной деформации межатомной связи в направлении, перпендикулярном плоскости графена

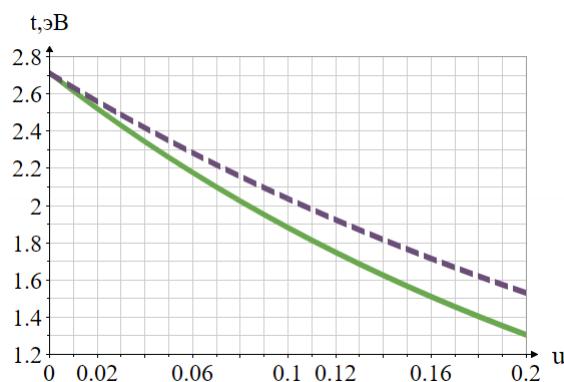


Рис. 5. сравнение аналитических выражений прыжкового интеграла. Пунктирной линией представлено выражение по формуле (9). Сплошная линия соответствует (7) формуле

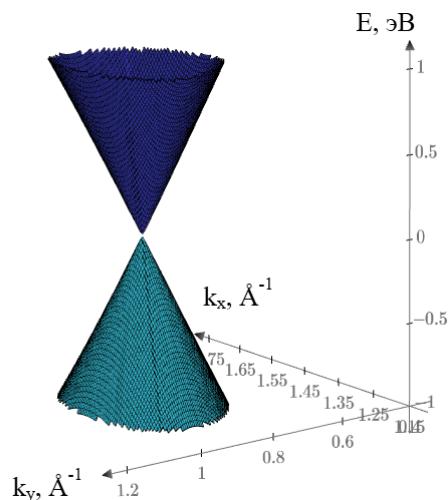


Рис. 6. Электронный спектр графена без деформаций: по вертикали отложена энергия, а в горизонтальной плоскости – компоненты волнового вектора

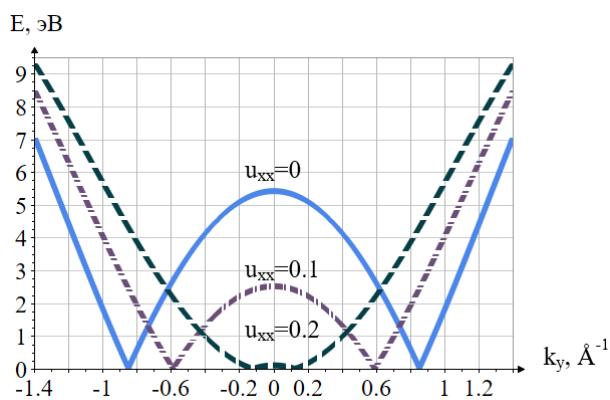


Рис. 7. Зонная структура графена в окрестности точек Дирака при одноосных деформациях вдоль направления зигзаг

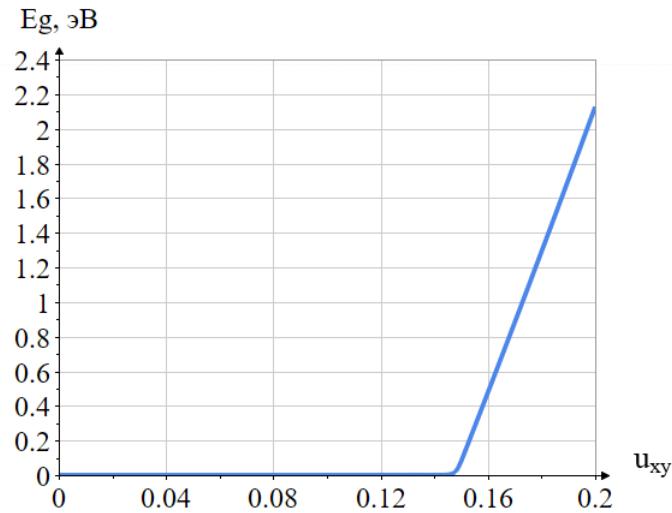


Рис. 8. Запрещенная зона деформированного графена в окрестности точек Дирака при сдвиговых деформациях u_{xy}

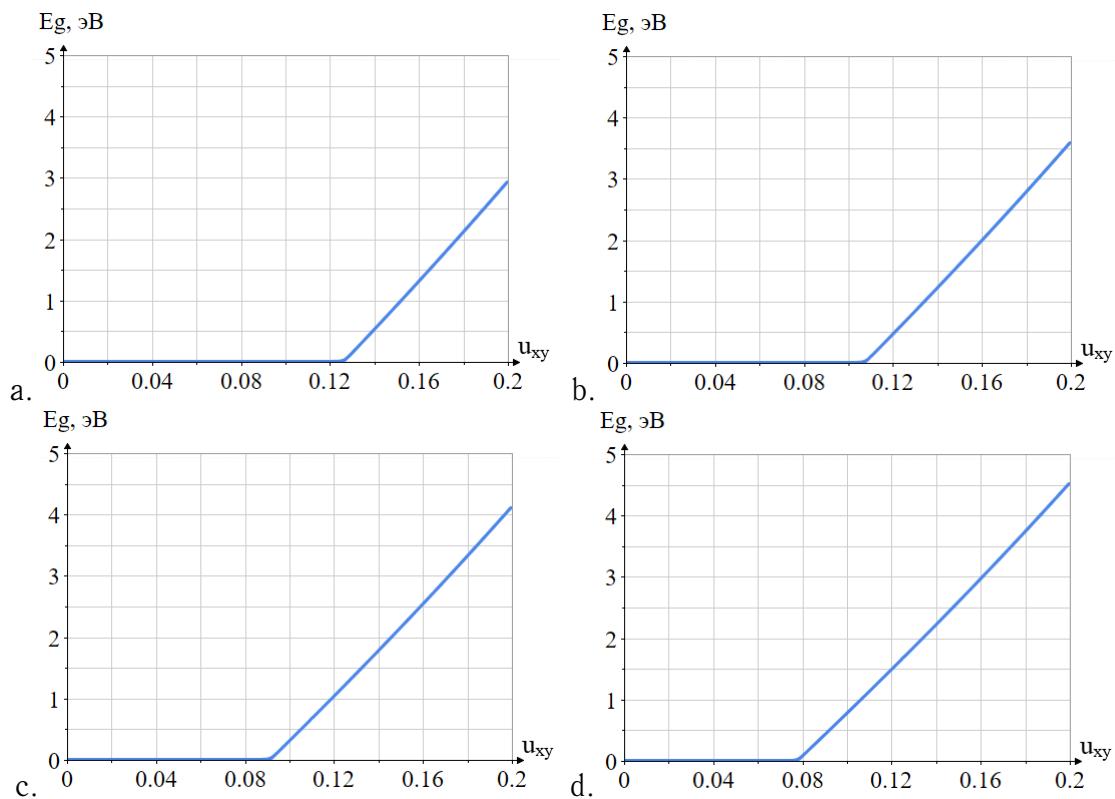


Рис. 9. Запрещенная зона деформированного графена в окрестности точек Дирака при смешанной деформации а. $u_{xx} = 0.05$, б. $u_{xx} = 0.1$, в. $u_{xx} = 0.15$, д. $u_{xx} = 0.20$

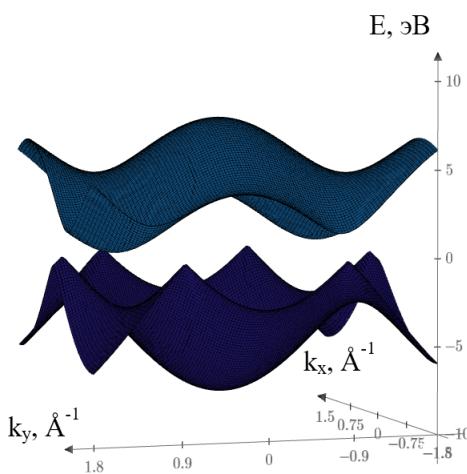


Рис. 10. Двумерный электронный спектр графена в зоне Бриллюэна без деформаций (нижнее полупространство) при смешанной деформации $u_{xx} = 0.05$, $u_{xy} = 0.15$ (верхнее полупространство)

Заключение

Из проведенных исследований можно сделать следующие выводы. Если деформации структуры сохраняют трансляционную симметрию кристаллита, то открытие энергетической щели не происходит. Запрещенная зона появляется при больших значениях относительной деформации, выходящей из упругого диапазона или же при смешанных деформациях растяжения и сжатия. Величина запрещенной зоны при допустимых деформациях в графене соответствует значениям у современных полупроводников, что дает возможность использовать графеновые наноленты в электронике.

Неупругие (пластические) деформации в графене обусловлены появлением петлевых дислокаций при нанесении графена на подложку из других металлов или полупроводников. Поле пластических деформаций вызывает изменение электронного спектра двумерных структур, а после открытия энергетической щели и тензора эффективной массы [12], и, как следствие, их кинетических характеристик и оптических свойств [13].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Герт, А. В. Эффективный гамильтониан силицина в присутствии электрического и магнитного полей / А. В. Герт, М. О. Нестоклон, И. Н. Яссиевич // ЖЭТФ. — 2015. — Т. 148, № 1. — С. 133–139.
- Антонова, И. В. Страйнтроника двумерных неорганических материалов для электронных и оптических приложений / И. В. Антонова // УФН. — 2022. — Т. 192, вып. 6. — С. 609–641.
- Устойчивый ферромагнетизм в квазисвободном графене / А. Г. Рыбкин, А. В. Тарасов, А. А. Гогина, А. В. Ерыженков, А. А. Рыбкина // ЖЭТФ. — 2023. — Т. 117, вып. 8. — С. 626–631.
- Экспериментальная реализация квазисвободного графена на подложке SiC(0001) с интеркалированными слоями Au и Co / А. А. Рыбкина, А. А. Гогина, М. В. Лихолетова, Д. А. Пудиков, А. В. Королева, П. Д. Лыжова, А. В. Ерыженков, Е. А. Григорьев, А. Г. Рыбкин // ЖЭТФ. — 2025. — Т. 167, вып. 4. — С. 517–527.

5. Ахунова, А. Х. Петлевые дислокации и дисклинации в методе виртуальных дефектов / А. Х. Ахунова, Ю. А. Баимова // Физика твердого тела. — 2003. — Т. 45, вып. 9. — С. 1626–1636.
6. Лебедева, О. С. Пьезопроводимость графеновых нанолент. Упругопластические деформации / О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев // Физика твердого тела. — 2024. — Т. 66, вып. 4. — С. 608–614.
7. Бондарь, А. С. Деформационные свойства двумерных графеновых структур в полях пластических деформаций / А. С. Бондарь, О. С. Лебедева, Н. Г. Лебедев // Материаловедение, формообразующие технологии и оборудование 2024 (ICMSSTE 2024): материалы международной научно-практической конференции (28–30 мая 2024 г.) . — Симферополь : ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского», 2024. — С. 152–156.
8. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — М. : ФИЗМАТЛИТ, 2003. — 264 с.
9. Suzuki, H. Ando T. Phonons and electron-phonon scattering in carbon nanotubes / H. Suzuki // Physical Review B. — 2002. — Vol. 65, № 235412
10. Алексенко, А. Г. Графен / А. Г. Алексенко. — М. : БИНОМ. Лаборатория знаний, 2014. — 168 с.
11. Hamiltonian for motion and merging of Dirac points in a two-dimensional crystal / G. Montambaux, F. Piechon, J.-N. Fuchs, M. O. Goerbig // The European Physical Journal B. — 2009. — Vol. 72. — P. 509–520.
12. Бадикова, П. В. Вычисление тензора эффективной массы в ϵ - и ξ -фосфорене методом теории функционала плотности / П. В. Бадикова, Д. В. Завьялов, В. И. Конченков // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2023. — Т. 26, № 2. — С. 52–60. — DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.2.5>
13. Бадикова, П. В. Предельно короткие оптические импульсы в углеродных нанотрубках с учетом многофотонного поглощения в присутствии случайного напряжения / П. В. Бадикова, Д. В. Завьялов, В. И. Конченков // Математическая физика и компьютерное моделирование. — 2022. — Т. 25, № 2. — С. 42–47. — DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.2.4>

REFERENCES

1. Gert A.V., Nestoklon M.O., Yassievich I.N. Effective Hamiltonian of Silicene in the Presence of Electric and Magnetic Fields. *ZhETF*, 2015, vol. 148, no. 1, pp. 133-139.
2. Antonova I.V. Straintronics of Two-Dimensional Inorganic Materials for Electronic and Optical Applications. *UFN.*, 2022, vol. 192, iss. 6, pp. 609-641.
3. Rybkin A.G., Tarasov A.V., Gogina A.A., Eryzhenkov A.V., Rybkina A.A. Stable Ferrimagnetism in Quasi-Free-Standing Graphene. *ZhETF*, 2023, vol. 117, iss. 8, pp. 626-631.
4. Rybkina A.A., Gogina A.A., Likholtsova M.V., Pudikov D.A., Koroleva A.V., Lyzhova P.D., Eryzhenkov A.V., Grigoryev E.A., Rybkin A.G. Experimental Implementation of Quasi-Free-Standing Graphene on a SiC(0001) Substrate with Intercalated Au and Co Layers. *ZhETF*, 2025, vol. 167, iss. 4, pp. 517-527.
5. Akhunova A.Kh., Baimova Yu.A. Loop Dislocations and Disclinations in the Virtual Defect Method. *Fizika tverdogo tela*, 2003, vol. 45, iss. 9, pp. 1626-1636.
6. Lebedeva O.S., Lebedev N.G. Piezoductivity of Graphene Nanoribbons. Elastic-Plastic Deformations. *Fizika tverdogo tela*, 2024, vol. 66, iss. 4, pp. 608-614.
7. Bondar A.S., Lebedeva O.S., Lebedev N.G. Deformation Properties of Two-Dimensional Graphene Structures in Plastic Deformation Fields. *Materialovedenie, formoobrazuyushchie tekhnologii i oborudovanie 2024 (ICMSSTE 2024): materialy mezhdunarodnoy nauchno-prakticheskoy konferentsii (28–30 maya 2024 g.)*. Simferopol, FGOU VO «KFU im. V.I. Vernadskogo», 2024, pp. 152-156.
8. Landau L.D., Lifshits E.M. Theoretical Physics. Vol. VII. Theory of Elasticity.. Moscow, FIZMATLIT, 2003. 264 p.

9. Suuura H. Ando T. Phonons and Electron-Phonon Scattering in Carbon Nanotubes. *Physical Review B*, 2002, vol. 65, no. 235412
10. Alekseenko A.G. Graphene. Moscow, BINOM. Laboratoriya znaniy, 2014. 168 p.
11. Montambaux G., Piechon F., Fuchs J.-N., Goerbig M.O. Hamiltonian for Motion and Merging of Dirac Points in a Two-Dimensional Crystal. *The European Physical Journal B*, 2009, vol. 72, pp. 509-520.
12. Badikova P.V., Zavyalov D.V., Konchenkov V.I. Calculation of the Effective Mass Tensor in ϵ - and ξ -Phosphorene by the Density Functional Theory Method. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie*, 2023, vol. 26, no. 2, pp. 52-60. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2023.2.5>
13. Badikova P.V., Zavyalov D.V., Konchenkov V.I. Extremely Short Optical Pulses in Carbon Nanotubes Taking Into Account the Multiphoton Absorption in the Presence of Random Stress. *Matematicheskaya fizika i kompyuternoe modelirovanie*, 2022, vol. 25, no. 2, pp. 42-47. DOI: <https://doi.org/10.15688/mpcm.jvolsu.2022.2.4>

BAND STRUCTURE OF STRESS-STRAIN GRAPHENE

Alexander S. Bondar

Postgraduate student of the Department of Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
sahhabond@gmail.com
<https://orcid.org/0009-0001-3214-3175>
Volgograd, University Avenue, 100

Olga S. Lebedeva

Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Lecturer, Department of
Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
lebedeva_os@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-3502-9570>
Volgograd, University Avenue, 100

Nikolay G. Lebedev

Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor of the Department of
Theoretical Physics and Wave Processes,
Volgograd State University
nikolay.lebedev@volsu.ru
<https://orcid.org/0000-0002-4400-8982>
Volgograd, University Avenue, 100

Abstract. Ideal graphene exhibits conductive properties due to the absence of a band gap in its electron spectrum. A number of experimental studies demonstrate the possibility of obtaining a band gap in graphene by placing it on various substrates. Graphene on a substrate can undergo various types of structural deformations, which affects the electronic structure of the material under study. In this paper, an approach is proposed for accounting for the influence of elastic and plastic deformation fields on the electronic structure of graphene-like structures within the framework of the tight-binding model. The

novelty of the proposed model lies in its consideration of the inhomogeneity of the hopping integral between nearest-neighbor atoms. A method is presented for estimating the main energy parameter of the model—the matrix element of the transition between nearest carbon atoms (hopping integral)—in the region of local deformation of the graphene structure caused by a loop dislocation. The dependence of the electron energy spectrum on the magnitude of the uniaxial and shear components of the strain tensor is proposed and analyzed. Analysis of the model revealed the effect of movement and merging of Dirac cones. The study demonstrates that only after fusion does the band gap open and further expand under shear deformation. With only diagonal components of the strain tensor, fusion of Dirac points does not occur, and no band gap appears. Based on the constructed model, it is possible to predict the required strain values ??to achieve a stable band gap in graphene, and therefore its semiconductor properties. The resulting model also demonstrates the possibility of controlling the semiconductor properties.

Key words: tight-binding method, Dirac points, plastic deformations, virtual dislocations, hopping integral.