

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

دانشگاه کردستان

بررسی اثر هال در گرافن

پایان نامه کارشناسی ارشد

لیلا تیموری خندان

استاد راهنما: دکتر محمد رضا ستاره

آذر ۸۹

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

تشکر و قدر دانی

اکنون که با لطف و یاری خداوند این پایان نامه را به اتمام رسانیده‌ام، جا دارد از تمامی کسانی که مرا در این راه یاری رسانده اند، کمال تشکر را داشته باشم. علی الخصوص مادر خوبم، برادر عزیزم علی و خواهر بسیار مهربانم افسانه.

چکیده

در این پایان نامه ابتدا ساختار گرافن را مورد بررسی قرار داده‌ایم، به این ترتیب که دو پایه معرفی شده برای گرافن را ارائه کرده‌ایم و تقریب بستگی قوی را برای دو پایه بررسی کرده‌ایم و همچنین این تقریب را در مدل کوانتس دوم برای گرافن یک لایه و دو لایه مطالعه کرده ایم. در ادامه اثر هال کلاسیک را بیان کرده و اثر هال کوانتومی را در گاز الکترونی دو بعدی مرور کرده‌ایم. سپس یک صفحه گرافنی را تحت تأثیر میدان مغناطیسی در دمای صفر و در دمای محدود بررسی کرده و ترازهای انرژی را بدست آورده‌ایم، با استفاده از تئوری تک حلقه، رسانش هال در گرافن را محاسبه نموده‌ایم. سرانجام اثر کوانتومی هال صحیح و کسری را در گرافن مطالعه کرده‌ایم.

فهرست

۱	مقدمه
۱-۱	گرافن
۲-۱	اتم کربن و هیبریداسیون آن
۲	ملاحظه ای بر مدل هامیلتونین بستگی قوی برای گرافن
۱-۲	مدل هامیلتونی بستگی قوی برای گرافن
۱-۱-۲	ملاحظات شبکه
۲-۱-۲	هامیلتونین بستگی قوی
۳-۱-۲	نقاط دیراک و بسط انرژی پایین
۲-۲	کوانتش دوم
۳-۲	عملگرهای چگالی و چگالی حالات

- ۲۷ پتانسیل ناخالصی ۴-۲
- ۲۸ گرافن دو لایه ۵-۲

۳ اثر کوانتومی هال

- ۳۳ تئوری اثر هال معمولی ۱-۳
- ۳۵ اثر کوانتومی هال ۲-۳
- ۳۵ گاز الکترونی دو بعدی ۳-۳
- ۳۷ ترازهای لاندائو و تابع موج الکترون تحت تأثیر میدان مغناطیسی ۴-۳
- ۴۴ رسانش کوانتومی هال ۵-۳
- ۴۷ اثر کوانتومی هال صحیح ۶-۳
- ۵۱ نقش ناخالصی ۷-۳
- ۵۳ اثر لبه ها ۸-۳
- ۵۷ اثر کوانتومی هال کسری ۹-۳
- ۵۷ ۱-۹-۳ تابع موج لافلین

۴ اثر کوانتومی هال در گرافن

- ۶۱ میدان برهم کنشی دیراک تحت میدان مغناطیسی در دمای صفر ۱-۴
- ۶۵ میدان برهم کنشی دیراک تحت میدان مغناطیسی در دمای محدود ۲-۴
- ۷۰ ناوردائی تحت تبدیل پیمانه‌ای بزرگ برای یک پتانسیل شیمیائی ۳-۴

۷۴	۴-۴ محاسبه تابع پارش در نمایش تابع زتا
۹۵		۵-۴ تعداد ذرات ، چگالی جریان ، رسانش هال و فاکتور پرشدگی در گرافن
۹۷	۶-۴ اثر کوانتومی هال در گرافن در دمای اتاق
۱۰۰	۷-۴ اثر کوانتومی هال صحیح در گرافن
۱۰۱	۴-۷-۱ محاسبه فازبری در گرافن
۱۰۴	۸-۴ اثر کوانتومی هال کسری در گرافن
۱۰۷	مراجع

فصل اول

مقدمه

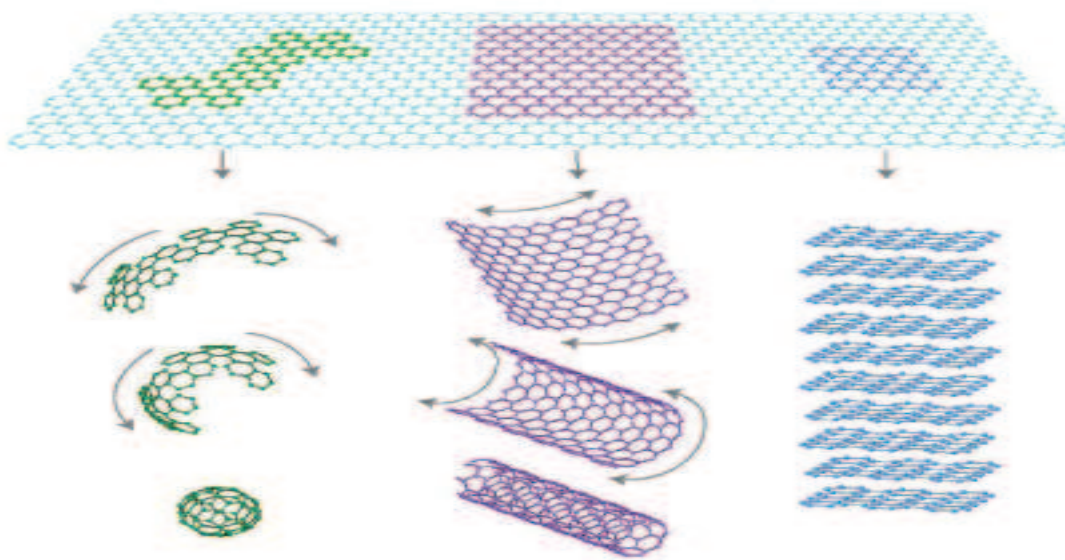
۱-۱ گرافن

یک صفحه گرافن^۱ خالص یک لایه مسطح از اتمهای کربن است که در یک شبکه شش گوشه به یکدیگر مقیدند. گرافن مهمترین سیستم دو بعدی قابل تصور است. ساختار شش گوشه گرافن آن را مادر همه سیستمهای با پایه کربن کرده است: گرافیت مجموعه ای از لایه های گرافن است که روی هم انباشته شده اند، نانو تیوب کربن از صفحه های لوله شده گرافن ساخته شده و فولرنها^۲ که تکه های کوچک برگه های گرافن به هم دوخته شده تا یک سطح کرووی تشکیل دهند. این شکلهای گرافن خیلی قبل تر از گرافن جداسازی شده و در موارد بسیاری به کار گرفته شده اند، اما همه خواص الکتریکی، مغناطیسی و... آنها از گرافن نشأت

^۱ Graphene

^۲ fullerene

می گیرد. شکل (۱.۱.۱)



شکل ۱.۱.۱ گرافن ماده سازنده برای مواد کربنی با همه ابعاد [۳۴]

علی رغم اینکه گرافن به تازگی جداسازی شده، قبلاً درصدها مقاله مورد توجه قرار گرفته است و دلیل آن خواص منحصر به فرد گرافن به خاطر ساختار شش گوشه آن است که مشاهده اثرات قوی نسبیتی را در سرعت‌های بسیار پایین تر از سرعت نور مجاز می کند. در گرافن، واکنش بین الکترون‌ها و ساختار شش گوشه سبب میشود که الکترون‌ها به گونه‌ای رفتار کنند که اگر آنها بی جرم بودند، به همین دلیل الکترون‌ها در گرافن از معادله دیراک^۳ (توصیف کوانتوم مکانیکی حرکت نسبیتی الکترون‌ها) تبعیت می کنند و بنابراین آنها فرمیون‌های دیراک نامیده می شوند.

ما قبلاً با فرمیون‌های بی جرم دیراک آشنا شده ایم (فیزیک ذرات پر انرژی، نوترینوها) اما نوترینوها بار الکتریکی ندارند و بنابراین با هیچ نوعی از ماده قویاً برهم کنش نمی کنند. فرمیون‌های دیراک در گرافن برعکس حامل یک واحد بار الکتریکی هستند و بنابراین می

^۳ Dirac equation

توانند تحت تأثیر میدانهای الکترومغناطیسی قرار بگیرند.

رفتار نسبیتی الکترونها در گرافن اولین بار توسط نظریه پرداز کانادایی فیلیپ راسل والاس^۴ پیش بینی شد [۱]. در آن زمان هیچ کس اعتقاد به وجود یک جامد با ضخامت یک اتم نداشت، بنابراین والاس در عوض مدل گرافن را به عنوان نقطه شروع مطالعه اش روی گرافیت استفاده کرد.

با این وجود تا سال 2004 به صورت عمده این اعتقادات وجود داشت که: الف) یک صفحه گرافن در مقابل اثرات گرمایی و دیگر اُفت و خیزها ناپایدار است. ب) حتی اگر یک صفحه گرافن پایدار باشد جداسازی آن برای مطالعه ویژگیهای سیستماتیک آن غیر ممکن است. در آن سال آندره گیم^۵ و گروهش در دانشگاه منچستر انگلستان نشان دادند که هر دو مورد بالا اشتباه است، آنها صفحات گرافنی واحد را تولید کردند و این صفحات به راستی واحد را روی سطح یک زیر لایه SiO_2 مطالعه کردند [۳۴]. بعدها کشف شد که صفحات کوچک گرافن نیازی ندارند تا روی یک زیر لایه بمانند، اما میتوانند آزادانه از یک داربست آویزان باشند. همین طور صفحات دو لایه و چند لایه گرافنی ساخته شد تا ویژگیهایشان توصیف شود.

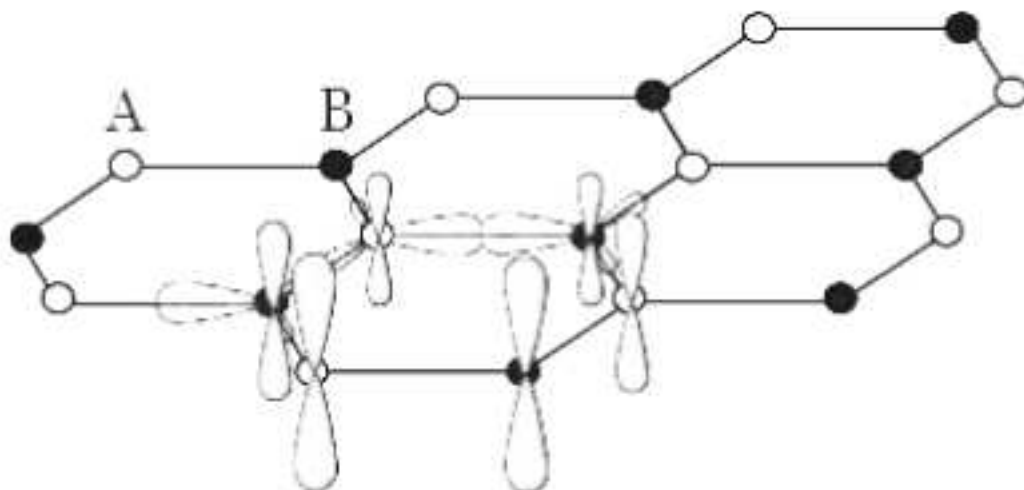
۱-۲ اتم کربن وهیبریداسیون آن

کربن اصلی ترین جزء گرافن و گرافیت، ششمین عنصر جدول تناوبی است. این اتم بنابراین از شش الکترون، تعداد A نوترون و شش پروتون ساخته شده است که $A = 6, 7$ ایزوتوپهای پایدار اتم کربن را توصیف می کنند و $A = 8$ ایزوتوپ رادیو اکتیو اتم کربن را توصیف می کند. ایزوتوپ ^{12}C با یک اسپین هسته $I = 0$ مرسوم ترین نوع کربن در طبیعت یعنی 99 درصد همه اتمهای کربن را تشکیل میدهد در صورتیکه فقط 1 درصد از نوع ^{13}C با اسپین هسته $I = \frac{1}{2}$

^۴ Philip Russell Wallace

^۵ Andre Geim

می باشد. در حالت پایه، اتم کربن شش الکترون در ساختار خود به صورت $1s^2 2s^2 2p^2$ دارد. الکترونها $2s, 2p$ یک اوربیتال هیبریدی sp^2 تشکیل می دهند که سه الکترون جایگزیده هستند. همانطور که در شکل (۱.۲.۲) می بینیم این ابرهای الکترونی در یک صفحه



شکل ۱.۲.۲ مدل اوربیتالهای هیبریدی برای اتمهای کربن در گرافن

با همپوشانی این اوربیتالهای sp^2 با اتمهای همسایه الزاماً اوربیتالهای قوی σ تشکیل می شود. این اوربیتالها به رسانش نسبت داده نمی شوند. الکترون آخر حامل بار آزاد می شود و یک اوربیتال π تشکیل می دهد که غیر جایگزیده بوده و عمود بر صفحه شبکه است. این الکترون است که نقش رسانش را ایفا می کند و تابع موج برای این الکترون نوشته می شود. ما با استفاده از تئوری بلوخ تابع موج الکترون را در دو پایه نوشته و ویژه مقادیر انرژی را برای آن بدست می آوریم. سپس کوانتتش دوم را معرفی کرده و شکل عملگر هامیلتونی و عملگرهای نردبانی و تبدیل فوریه آنها را در دو پایه برای گرافن یک لایه و دو لایه بدست می آوریم.

در فصل سوم تاریخچه‌ای از اثر هال کلاسیک بیان کرده و با اعمال یک میدان مغناطیسی عمودی بر گاز الکترونی دو بعدی ترازهای انرژی را برای آن بدست می‌آوریم، با اعمال یک میدان الکتریکی طولی علاوه بر میدان مغناطیسی سکوهای رسانشی کوانتومی هال را برای آن محاسبه کرده و برای این نمونه نقش ناخالصی و اثر لبه‌ها را مورد توجه قرار می‌دهیم.

در فصل چهارم یک برگه گرافنی را تحت تأثیر میدان مغناطیسی در دمای صفر و دمای محدود بررسی می‌کنیم و با استفاده از تئوری تک حلقه سکوهای رسانشی غیر معمول کوانتومی هال را برای گرافن محاسبه می‌کنیم و ملاحظه می‌کنیم که اختلاف رسانش گرافن یک لایه و دو لایه در اختلاف پرش اطراف صفر پتانسیل است و همین پتانسیل شیمیائی به عنوان قسمت موهومی بردار پتانسیل موجب پدید آمدن یک فاز برای دترمینان می‌شود. سپس اثر کوانتومی هال در گرافن را در دمای اتاق بررسی می‌کنیم. اثر کوانتومی صحیح هال را در گرافن مورد توجه قرار می‌دهیم و فاز شیه کلاسیکی بری را که به عنوان یکی از دلایل سکوهای غیر معمول هال در گرافن مطرح می‌شود، برای آن محاسبه می‌نمائیم و به عنوان آخرین مطلب اثر کوانتومی کسری هال در گرافن را بیان می‌کنیم.

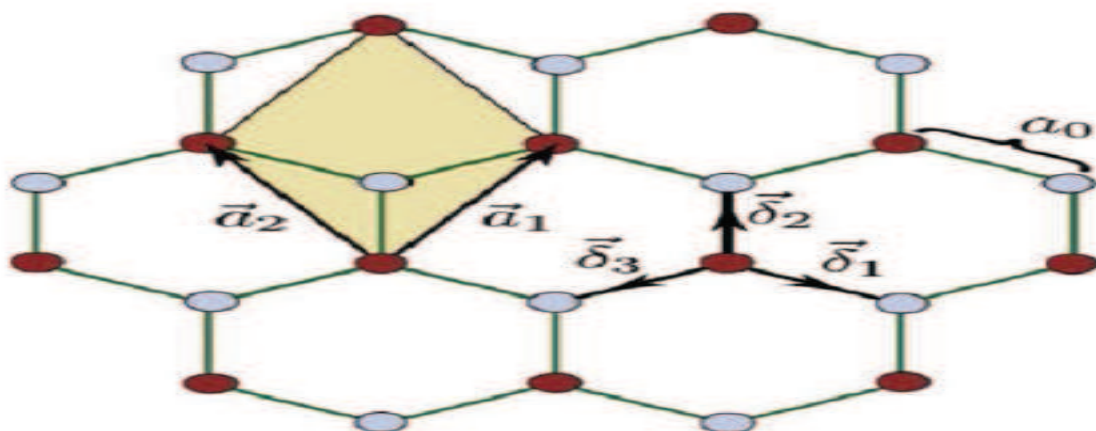
فصل دوم

ملاحظه ای بر مدل هامیلتونین بستگی قوی برای گرافن

۱-۲ مدل هامیلتونی بستگی قوی برای گرافن

همانطور که در فصل پیش ذکر شد اتمهای کربن در گرافن به خاطر هیبریداسیون sp^2 شان در یک شبکه شش گوشه متراکم شده اند. شبکه شش گوشه یا لانه زنبوری گرافن یک شبکه براوه نیست چون طبق تعریف شبکه براوه، دو سایت نزدیکترین همسایه یک اتم هم ارز نیستند. اما با در نظر گرفتن دو نوع اتم A, B برای شبکه شش گوشه آنگاه دو زیر شبکه A, B شبکه های براوه مثلثی هستند، بنابراین می توان شبکه لانه زنبوری گرافن را به عنوان یک شبکه براوه مثلثی با پایه دو اتمی در نظر گرفت. شکل (۲.۱.۱)

دیدیم که یک ویژگی گرافن حضور دو اتم برای سلول واحد است . تئوری فیزیک حالت



شکل ۲.۱.۱ انتخاب دو زیر شبکه A و B برای سلول گرافن

جامد برای چنین سیستمهایی معرفی پایه های بستگی قوی را ایجاب می کند که انتخاب آنها منحصر به فرد نیست . مقادیر چشمداشتی کمیات قابل اندازه گیری فیزیکی مستقل از پایه هاست . با این وجود در عمل اغلب اوقات اثبات این موضوع سراسر نیست ، به ویژه اگر مقادیر چشمداشتی اپراتورهای مشخص مستقل از پایه ها باشد ، شکلشان باید وابسته به پایه ها باشد . ما در این پایان نامه دو پایه ارائه می کنیم و هامیلتونین بستگی قوی 1 و بسط انرژی پایین آن را به زبان کوانتاش اول می نویسیم ، همچنین فرمالیسم کوانتاش دوم متناظر رانیز ارائه می کنیم [۲] .

برای گرافن یک لایه ، یک انتخاب پایه میتواند به این صورت باشد که یک سلول واحد به عنوان منشاء تابع موج بلوخ در نظر گرفته شود . این پایه شامل توابع موج اوربیتالهای p_z قرار داده شده روی دو اتم کربن سلول واحد است ، این توابع موج فاکتور فازی یکسانی دارند که بوسیله موقعیت منشاء سلول واحد تعیین می شود . اما پایه دوم به این صورت انتخاب می شود

¹ Tight-Binding Hamiltonian

که موقعیت هر یک از دو در اتم سلول واحد به عنوان مرکز تابع موج بلوخ استفاده می شود . بنابراین پایه دوم شامل توابع موج اوربیتالهای p_z روی دو اتم کربن قرار داده شده است که فاکتورهای فازشان متفاوت است و بوسیله موقعیت اتم متناظر تعیین می شود . همچنین گرافن دو لایه 2 که چهار الکترون برای سلول واحد خود دارد و در نتیجه حداقل دو انتخاب پایه برای آن وجود دارد ، توابع موج چهار اوربیتال p_z فازهای متفاوتی دارند که بوسیله موقعیت چهار اتم در سلول واحد داده می شود .

۱-۱-۲ ملاحظات شبکه

از آنجاییکه شبکه گرافن یک شبکه دوره‌ای است، برای نوشتن ویژه حالت‌های هامیلتونین شبکه می‌توان از تئوری بلوخ استفاده کرد . (بر طبق این تئوری ویژه توابع موج برای یک پتانسیل دوره ای به شکل حاصل ضرب یک موج تخت $\exp(ik.r)$ در یک تابع $u_k(r)$ با دوره شبکه بلور است. شاخص پایین k نشان میدهد که تابع $u_k(r)$ به بردار موج k بستگی دارد.) در تقریب بستگی قوی ویژه توابع هامیلتونین به صورت ترکیبات خطی از توابع موج اتمی در هر یک از مکانهای A, B نوشته شود. ارائه مرسوم این ترکیب خطی به صورت زیر است [۲]:

$$\psi_\nu^A(r) = c_\nu^A(k) \psi_\nu^{Ak}(r) + c_\nu^B(k) \psi_\nu^{Bk}(r) \quad (2.1)$$

که $\nu = 1, 2$ مربوط به پایه‌های اول و دوم است.

برای پایه اول :

$$\begin{aligned} \psi_1^A(r) &= c_1^A(k) \psi_1^{Ak}(r) + c_1^B(k) \psi_1^{Bk}(r) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum \exp(ik.R_j) [c_1^A(k) \phi(r - R_j^A) + c_1^B(k) \phi(r - R_j^B)] \end{aligned} \quad (2.2)$$

که N شماره سلولهای اصلی است و توابع $\phi(r)$ تابع موج اوربیتالهای p_z اتمهای کربن هستند. همانطور که در زیر توصیف می شود ضرایب $c_1^{A/B}$ طوری انتخاب می شوند که $\psi_k(r)$ یک ویژه حالت هامیلتونین بستگی قوی باشد. بردار $R_j = na_1 + ma_2$ با $j = (n, m)$ موقعیت سلول واحد را در گرافن تعیین میکند با $a_1 = a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + a\frac{3}{2}\hat{j}$ و $a_2 = -a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + a\frac{3}{2}\hat{j}$ که a فاصله بین دو نزدیکترین همسایه است، همچنین $R_j^{A/B}$ به ترتیب موقعیت اتمهای A, B است. برای پایه اول برای سادگی فرض می کنیم موقعیت سلولهای واحد بوسیله موقعیت اتمهای A داده می شود:

$$\vec{R}_j^A = \vec{R}_j \quad (2.3)$$

در انتخاب ما از سیستم مختصات اتمهای B در موقعیت:

$$\vec{R}_j^B = \vec{R}_j^A + \vec{\delta}_3 = \vec{R}_j + \vec{\delta}_3 \quad (2.4)$$

قرار دارند که بردار $\vec{\delta}_3 = \vec{\delta}_{AB}$ یکی از سه برداری است که اتم A را به سه نزدیکترین همسایگی وصل می کند:

$$\delta_1 = a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} \quad (2.5)$$

$$\delta_2 = -a\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{i} + \frac{a}{2}\hat{j} \quad (2.6)$$

$$\delta_3 = -a\hat{j} \quad (2.7)$$

همان طور که در شکل (۲.۱.۱) رسم شده است. توجه داریم که انتخاب مبداء مانند انتخاب سیستم مختصات دلخواه است.

در این ارائه ویژه حالت هامیلتونین بستگی قوی یک ترکیب تابع موج اتمی است که یک فاکتور فاز به هر سلول متصل میکند تا یک تابع موج بلوخ بسازد.

در ارائه پایه دوم، ویژه حالت هامیلتونین را بصورت ترکیب خطی از دو تابع بلوخ متناظر بترتیب با اتمهای A, B می نویسیم، اما با یک فاکتور فازی متفاوت متصل به هر اتم A, B .

$$\begin{aligned} \psi_2^A(r) &= c_2^A(k) \psi_2^{Ak}(r) + c_2^B(k) \psi_2^{Bk}(r) \\ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum [\exp(ik.R_j^A) c_2^A(k) \phi(r - R_j^A) + \exp(ik.R_j^B) c_2^B(k) \phi(r - R_j^B)] \end{aligned} \quad (2.8)$$

این ارائه دوم در مقاله والاس برای ساختار باند گرافیت استفاده شده است [۱].

بنابراین می بینیم که ما در هر یک از دو نوع ارائه یک پایه بستگی قوی $\psi_v^{Ak}(r), \psi_v^{Bk}(r)$ که $v = 1, 2$ انتخاب کرده ایم. همین طور ما می توانیم ببینیم که دو پایه در فاکتورهای فازی نسبی بین مؤلفه هایشان با هم تفاوت دارند. ویژه حالت‌های هامیلتونین بستگی قوی ترکیبات خطی از توابع موج پایه است. ما نشان می دهیم در حالیکه ضرایب ترکیبات خطی وابسته به پایه‌ها هستند ویژه حالت‌های این هامیلتونی در دو پایه یکسان است. همچنین مقدار انتظاری هر کمیت فیزیکی مستقل از انتخاب پایه‌هاست.

۲-۱-۲ هامیلتونین بستگی قوی

هامیلتونین بستگی قوی استفاده شده برای توصیف گرافن وابستگی بین نزدیکترین همسایه ها (i, B) و (j, A) را مجاز می کند. اگر t پارامتر بستگی بین نزدیکترین همسایه ها باشد، از آنجا بیکه هر اتم نوع A/B میتواند به سه نزدیکترین همسایه از نوع B/A متصل باشد آنگاه برای هامیلتونی بستگی قوی گرافن داریم:

$$\langle \phi_j^A | H | \phi_i^B \rangle = -t \quad (2.9)$$

بنابراین:

$$H = -t \sum (| \phi_j^A \rangle \langle \phi_i^B | + h.c.) \quad (2.10)$$

که $\langle \phi_j^A | \phi_j^{A/B} | \vec{r} \rangle = \phi(\vec{r} - \vec{R}_j^{A/B})$ ارائه استاندارد برای تابع موج $\phi_j^{A/B}$ است. ویژه معادلات برای ضرایب $c^{A/B}(k)$ به صورت سرراست از حل معادله $\langle \phi_j^{A/B} | H | \psi_v^k \rangle$ که $v = 1, 2$ و $\langle \psi_v^k | \vec{r} \rangle = \psi_v^k(\vec{r})$ بدست می آیند. بنابراین با جایگذاری H داریم:

$$\langle \phi_j^A | H | \psi_1^k \rangle = \quad (2.11)$$

$$\langle \phi_j^A | -t \sum (|\phi_j^A \rangle \langle \phi_i^B| + h.c.) | \frac{1}{\sqrt{N}} \sum \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_j) [c_1^A(k) |\phi_j^A \rangle + c_1^B(k) |\phi_i^B \rangle]$$

با ساده سازی طرف راست رابطه با لا استفاده از $\langle \psi_1^k | \psi_1^k \rangle = \epsilon(\vec{k})$ برای سمت چپ رابطه بدست می آوریم:

$$c_1^A(\vec{k})\epsilon(\vec{k}) = -t(\sum \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{R}_j))c_1^B(\vec{k}) \quad (2.12)$$

اگر همین مراحل را این بار برای $\langle \phi_i^B | H | \psi_1^k \rangle$ انجام دهیم به رابطه پایین می رسیم:

$$c_1^B(\vec{k})\epsilon(\vec{k}) = -t(\sum \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_j))c_1^A(\vec{k}) \quad (2.13)$$

که $R_j = na_1 + ma_2$ و n, m شماره همسایگی ها را تعیین می کند. برای مثال برای سه نزدیکترین همسایه نوع اول: $(n, m) = (0, 0), (0, 1), (1, 0)$ با قرار دادن این (n, m) در R_j و جایگزینی آن در سه رابطه بالا در نهایت بدست می آوریم:

$$\epsilon(\vec{k})c_1^A(\vec{k}) = -t(\exp(-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + \exp(-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 1)c_1^B(\vec{k}) \quad (2.14)$$

$$\epsilon(\vec{k})c_1^B(\vec{k}) = -t(\exp(i\vec{k}\cdot\vec{a}_1) + \exp(i\vec{k}\cdot\vec{a}_2) + 1)c_1^A(\vec{k})$$

روابط بدست آمده برای پایه های اول بود، اگر تمامی مراحل را برای پایه های دوم تکرار کنیم به معادلات زیر می رسیم :

$$\epsilon(\vec{k})c_2^A(\vec{k}) = -t(\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1) + \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2) + \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3))c_2^B(\vec{k}) \quad (۲.۱۵)$$

$$\epsilon(\vec{k})c_2^B(\vec{k}) = -t(\exp(i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1) + \exp(i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2) + \exp(i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3))c_2^A(\vec{k})$$

و با تعریف زیر :

$$f_1(\vec{k}) = -t(\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1) + \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2) + 1) \quad (۲.۱۶)$$

$$f_2(\vec{k}) = -t(\exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1) + \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2) + \exp(-i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3)) \quad (۲.۱۷)$$

می توانیم برای مثال برای پایه های اول داشته باشیم :

$$\epsilon(\vec{k})c_1^A(\vec{k}) = f_1(\vec{k})c_1^B(\vec{k})$$

$$\epsilon(\vec{k})c_1^B(\vec{k}) = f_1^*(\vec{k})c_1^A(\vec{k})$$

بنابراین :

$$\epsilon(\vec{k}) \begin{pmatrix} c_1^A(\vec{k}) \\ c_1^B(\vec{k}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & f_1(\vec{k}) \\ f_1^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^A(\vec{k}) \\ c_1^B(\vec{k}) \end{pmatrix} \quad (۲.۱۸)$$