Національна академія наук України
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова

Соболь Олександр Олександрович

УДК 530.145, 538.915

НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ У ГРАФЕНІ З ЗАРЯДЖЕНИМИ ДОМІШКАМИ

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Київ – 2017

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка.

Науковий керівник – доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник
Горбар Едуард Володимирович,
Київський національний університет
імені Тараса Шевченка,
професор кафедри квантової теорії поля,
фізичний факультет.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук,
старший дослідник
Шарапов Сергій Геннадійович,
Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова
Національної академії наук України,
завідувач лабораторії сильнокорельованих
низьковимірних систем;

доктор фізико-математичних наук, професор
Сиркін Євген Соломонович,
Фізико-технічний інститут низьких температур
ім. Б. І. Вєркіна Національної академії наук України,
провідний науковий співробітник лабораторії
чисельних методів у теоретичній фізиці.

Захист відбудеться «_11_» __січня__ 2018 р. о _12:30_ годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01 Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова Національної академії наук України за адресою: вул. Метрологічна 14-б, м. Київ, 03143, Україна.

Автореферат розісланий «_04_» __грудня__ 2017 р.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 26.191.01,
доктор фіз.-мат. наук В. Є. Кузьмичев

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Одразу після експериментального отримання графену в 2004 році вчені звернули увагу на цілу низку його унікальних властивостей: надвисоку міцність, теплопровідність, рухливість носіїв заряду, які зумовлюють перспективи його застосування у новітній наноелектроніці. До того ж, фізика графену цікава ще й з точки зору фундаментальних досліджень, адже вона має глибоку аналогію з квантовою електродинамікою в 2 просторових вимірах. Низькоенергетичні квазічастинкові збудження у цьому кристалі описуються рівнянням, яке подібне до безмасового (2+1)-вимірного релятивістського рівняння Дірака. Це дає можливість імітувати і спостерігати в твердотільних експериментах аналоги деяких квантових релятивістських явищ, які раніше не спостерігалися навіть у фізиці елементарних частинок. Серед них клейнівське тунелювання, надкритичний атомний колапс тощо. Наявність відкритих запитань стосовно електронних властивостей графену, таких як умови виникнення та особливості спостереження явища надкритичної нестабільності у кластерах з одно- та різнойменно заряджених домішок, у системах з дискретним спектром електронів, а також можливість регулювання ефективного заряду домішки в магнітному полі, визначає актуальність задач, розглянутих у дисертації.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Результати, що увійшли в дисертаційну роботу, були отримані на кафедрі квантової теорії поля фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка в рамках наступних наукових тем: у 2013–2015 рр. тема № 06БФ051-06 "Дослідження в фізиці і астрофізиці високих енергій, фізиці елементарних частинок та конденсованого стану" (№ д/р 01.06.U006394); у 2016–2017 рр. тема № 16БФ051-05 "Дослідження фундаментальних проблем фізики ядра, елементарних частинок та космомікрофізики" (№ д/р 01.16.U002562).

Мета і задачі дослідження. Метою досліджень, проведених у дисертації, є пошук умов виникнення явища надкритичної нестабільності у системах заряджених домішок у графені та вивчення його проявів. Для досягнення мети необхідно було розв'язати наступні задачі:

1. Визначити критичну відстань між двома однойменно зарядженими домішками, за якої настає надкритична нестабільність у системі, проаналізувати її залежність від заряду домішок та ширини квазічастинкової щілини. Обчислити енергію та ширину резонансу, який виникає у нижньому континуумі в надкритичному режимі.
2. Дослідити поведінку спектру та хвильових функцій електрона у потенціалі двох різнойменно заряджених домішок при зміні відстані між ними. З'ясувати можливість виникнення та прояви надкритичної нестабільності в цій системі.
3. Обчислити спектр та хвильові функції електрона в потенціалі зарядженої домішки на обмеженому листі графену, а також у графені в магнітному полі. Проаналізувати їх поведінку при збільшенні заряду домішки та зробити висновок щодо можливості реалізації надкритичної нестабільності. Врахувати вплив поляризаційних ефектів на екранування домішки у магнітному полі.

Об'єктом дослідження є електронні стани у графені в сильних електростатичних полях.

Предметами дослідження є спектр та хвильові функції електрона в полі заряджених домішок у графені, явище надкритичної нестабільності та його прояви в різних системах із зарядженими домішками у графені, поляризаційні явища у графені в магнітному полі.

Методи дослідження. Для обчислення критичної відстані між двома однойменно зарядженими домішками був використаний варіаційний метод Канторовича. Для визначення енергії та ширини резонансу в надкритичному режимі був застосований метод ВКБ у монопольному наближенні. Для знаходження спектру та хвильових функцій електрона у полі двох різнойменно заряджених домішок була використана техніка лінійних комбінацій атомних орбіталей, а також варіаційний метод Гальоркіна-Канторовича. При обчисленні спектру та хвильових функцій електрона на обмеженому листі графену граничні умови на краю листа було поставлено за допомогою моделі Боголюбова з нескінченною масою. Ефекти екранування домішки в магнітному полі були враховані за допомогою однопетльової поляризаційної функції графену.

Наукова новизна одержаних результатів.

У дисертаційній роботі отримано наступні нові результати:

1. Досліджено явище надкритичної нестабільності в найпростішому кластері з двох однойменно заряджених домішок у графені. Встановлено, що критична відстань між домішками зростає при збільшенні їх заряду і при зменшенні ширини квазічастинкової щілини. У граничному випадку безщілинного графену надкритична нестабільність настає при перевищенні сумарним зарядом критичного значення $2Z_c\alpha/\kappa = 1/2$, незалежно від відстані між домішками. Перехід у надкритичний стан супроводжується виникненням резонансу в нижньому континуумі.
2. Для системи з двох різнойменно заряджених домішок у графені зі щілиною в зонному спектрі показано, що при поступовому збільшенні відстані між домішками відбувається зміна локалізації хвильової функції електрона, який вийшов з діраківського вакууму, з негативно зарядженої домішки на позитивно заряджену. Це можна інтерпретувати як народження з вакууму пари електрона і дірки, кожен із яких перебуває у зв’язаному стані з відповідною домішкою, ефективно екрануючи її. Встановлено, що явище можливе лише в системі домішок, заряди яких перевищують певне порогове значення.
3. У системах, де спектр електронів є виключно дискретним, проведено аналіз поведінки енергії та хвильових функцій при поступовому збільшенні заряду домішки. Показано, що надкритична нестабільність виникає при перевищенні зарядом певного критичного значення. При цьому відбувається збурення хвильових функцій нижнього “квазіконтинууму”, яке цілком аналогічне до утворення резонансу.
4. Встановлено, що врахування поляризаційних ефектів у магнітному полі значно модифікує потенціал домішки. Екранування залежить від положення хімічного потенціалу, а тому його можна регулювати, прикладаючи напругу затвору. Показано, що екранування найбільш ефективне, коли хімічний потенціал лежить всередині одного з рівнів Ландау, і мінімальне, коли він знаходиться у проміжку між ними.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані результати мають теоретичний характер та описують електронні властивості графену з зарядженими домішками. Аналітичні та чисельні розрахунки, проведені в роботі, можуть слугувати в якості теоретичного підґрунтя для майбутніх експериментів. Отримані результати дозволяють здійснити широке узагальнення явища надкритичної нестабільності з випадку однієї зарядженої домішки, який був досліджений у літературі раніше, на випадок довільної системи з кількох домішок, як однойменних, так і різнойменних зарядів, яка може бути обмежена у просторі і перебувати в зовнішньому магнітному полі.

Особистий внесок здобувача. Результати, що виносяться на захист, отримані здобувачем самостійно. У роботах, опублікованих у співавторстві, до дисертації включені лише ті результати, що належать автору. Наступні результати отримані самостійно:

У роботі про два однойменно заряджені центри [1] здобувач обчислив залежність критичної відстані між домішками від їх заряду, а також провів аналітичні розрахунки енергії та ширини резонансу в надкритичному режимі.

У роботі [2] дисертанту належить реалізація варіаційного методу Канторовича з 2 доданками в анзаці для обчислення критичної відстані між домішками.

У роботі про надкритичну нестабільність у потенціалі диполя [3] дисертант отримав спектр та хвильові функції електрона і дослідив їх залежність від відстані між домішками, які утворюють диполь.

У роботі [4] здобувачем були проведені аналітичні розрахунки спектру та хвильових функцій електрона в модельному одновимірному потенціалі, а також чисельні розрахунки методом Гальоркіна-Канторовича для реального потенціалу двох різнойменно заряджених домішок.

У роботі [5] дисертант дослідив особливості виникнення надкритичної нестабільності у графені в магнітному полі, а також врахував поляризаційні ефекти при обчисленні екранованого потенціалу.

Апробація результатів дисертації. Матеріали дисертації пройшли апробацію на семінарі відділів астрофізики і елементарних частинок та теорії нелінійних процесів в конденсованих середовищах ІТФ НАН України (Київ, 15 травня 2017 р.) та на наступних конференціях: “Наука XXI сторіччя” (Київ, 15–16 травня 2013 р.); “Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики” (Київ, 13–15 травня 2014 р.); 2nd International Research and Practice Conference “Nanotechnology and Nanomaterials” (NANO-2014), (Львів, 27–30 серпня 2014 р.); “Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики” (Київ, 12–15 травня 2015 р.). Окрім того, результати дисертації обговорювалися на міжнародних конференціях “School and Workshop on Strongly Correlated Electronic Systems – Novel Materials and Novel Theories” (Трієст, 10–21 серпня 2015 р.), а також “Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems” (Трієст, 03–09 серпня 2016 р.).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 9 робіт, 5 із них складають статті в наукових журналах [1, 2, 3, 4, 5], а 4 – у працях конференцій [6, 7, 8, 9].

Структура дисертаційної роботи. Дисертаційна робота складається з анотації, вступу, 4 розділів, висновків, списку використаних джерел, що містить 92 найменування, та трьох додатків. Робота написана на 158 сторінках машинописного тексту, містить 41 рисунок.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ

У ***вступі*** було обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовані мета та задачі дослідження, показана наукова та практична цінність отриманих результатів, визначений особистий внесок здобувача, зазначені апробація результатів роботи та структура дисертації.

У ***першому розділі*** наведено огляд основних робіт, які стосуються низько-енергетичних електронних властивостей графену в наближенні сильного зв'язку. Описані явища, які випливають з квазірелятивістської поведінки електронів у графені, зокрема явище надкритичної нестабільності. Розглянуто низку теоретичних робіт, що описують явище надкритичного атомного колапсу в (3+1)-вимірній КЕД. Також проведено огляд робіт, які стосуються впливу магнітного поля на електронний спектр графену із кулонівськими домішками, наводяться результати експериментів, що свідчать про можливість ефективного регулювання сили потенціалу домішки у магнітному полі за допомогою напруги затвору.

У ***другому розділі*** досліджено надкритичну нестабільність у найпростішому кластері з двох однакових заряджених домішок у графені. Заряд кожної з них є докритичним, в той час як сумарний заряд двох домішок $2Ze$ перевищує критичне значення, що визначається зі співвідношення $\zeta_c = \frac{2Z_c\alpha}{\kappa} = \frac{1}{2}$. Таким чином, при фіксованому ζ надкритичний режим настає при певній відстані між домішками R_{cr}, яка також називається критичною.

Гамільтоніан задачі має вигляд:

$$\hat{H} = v_F \hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \boldsymbol{p} + \Delta \cdot \hat{\tau}_z + V(\boldsymbol{r}), \tag{1}$$

$$V(\boldsymbol{r}) = -\frac{Ze^2}{\kappa}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right), \tag{2}$$

де v_F – швидкість Фермі, $\hat{\tau}_i$ – матриці Паулі, Δ – напівширина квазічастинкової щілини, $\kappa = \frac{1+\kappa_{sub}}{2}$ – діелектрична проникність графену на підкладці, $r_{1,2} = \left|\boldsymbol{r} \pm \frac{\boldsymbol{R}}{\boldsymbol{2}}\right|$ – відстані від електрона до кожної з двох заряджених домішок. Рівняння Дірака $\hat{H}\Psi = E\Psi$ на двокомпонентний спінор $\Psi = (\phi, \chi)^T$ можна квадрувати, виразивши одну компоненту через іншу. Тоді отримаємо рівняння другого порядку:

$$(\partial_x^2 + \partial_x^2)\phi + \frac{\left(\frac{\partial V}{\partial x} - i\frac{\partial V}{\partial y}\right)}{E - V + \Delta}\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + i\frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{(E-V)^2 - \Delta^2}{(\hbar v_F)^2}\phi = 0 \tag{3}$$

Змінні в рівнянні Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів (2) не відокремлюються в жодній відомій ортогональній системі координат, тому для знаходження залежності критичної відстані R_{cr} від заряду домішок ζ використаємо наближені методи.

Грубу оцінку критичної відстані можна провести за допомогою методу зшивання асимптот точного розв'язку. Для цього потрібно знайти асимптотичні розв'язки рівняння (3) в околі домішок та при $r \to \infty$ і гладко зшити їх у проміжній області. В результаті отримаємо трансцендентне рівняння:

$$2\sqrt{1-\zeta^2} - 1 = 2\sqrt{m\zeta R}\,\frac{K'_{i\gamma}\left(2\sqrt{m\zeta R}\right)}{K_{i\gamma}\left(2\sqrt{m\zeta R}\right)}, \tag{4}$$

де $K_{i\gamma}$ – функція Макдональда уявного індексу, а $\gamma = \sqrt{4\zeta^2 - 1}$. Чисельний розв'язок цього рівняння зображений штрих-пунктирною лінією на рис. 1.

Більш точно критичну відстань можна обчислити за допомогою варіаційного методу Канторовича. Для його застосування слід помітити, що рівняння (3) можна отримати внаслідок дослідження на екстремум наступного функціоналу:

$$S[\psi] = \int \left\{ |\nabla\psi|^2 + 2\Im m \left(\psi^* \left[\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla\psi \right] \right) + 2(U - \epsilon)|\psi|^2 \right\} dxdy, \tag{5}$$

де $W = E - V + \Delta$, $\psi = W^{-1/2}\phi$, $\epsilon = \frac{E^2 - \Delta^2}{2(\hbar v_F)^2}$, U – деякий ефективний потенціал.

Пробну функцію $\psi(x, y)$ можна шукати у вигляді розкладу в ряд за набором відомих функцій однієї змінної, в той час як самі коефіцієнти розкладу є невідомими функціями іншої незалежної змінної. У даній задачі здійснимо варіаційну підстановку в наступному вигляді:

$$\psi = \sum_{k=1}^{N} \psi_k(\mu) \cdot \nu^{k-1}, \tag{6}$$

де нові незалежні змінні $\mu = \frac{4r_1 r_2}{R^2}$, $\nu = \frac{(r_1 - r_2)^2}{4r_1 r_2}$. Обирається наближення з певною кількістю доданків N, здійснюється варіаційна підстановка (6) до функціоналу (5), після чого в ньому можна провести інтегрування за змінною ν. Варіюючи його за функціями $\psi_k(\mu)$, отримаємо систему зв'язаних звичайних диференціальних рівнянь другого порядку

$$\frac{d}{d\mu}\left(P_{kl} \frac{d\psi_k}{d\mu} + R_{kl}^{\dagger}\psi_k \right) - Q_{kl}\psi_k - R_{kl}\frac{d\psi_k}{d\mu} = 0, \tag{7}$$

де матриці-коефіцієнти $\hat{P}$, $\hat{Q}$, $\hat{R}$ виражаються через повні еліптичні інтеграли 1 та 2 роду. Потрібно знайти таке значення відстані між домішками, за якого рівняння (7) мають обмежені на нескінченності розв'язки. Чисельне інтегрування рівнянь (7) здійснюється за допомогою методу пострілів ("шутінг"-методу).

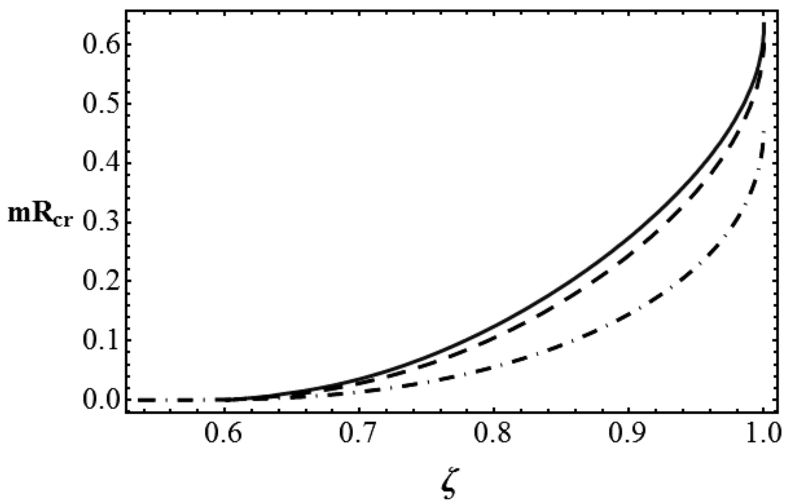

Рис. 1. Залежності критичної відстані від заряду домішок, отримані методом зшивання асимптот (штрих-пунктирна лінія) та за допомогою методу Канторовича з одним (штрихова лінія) та двома (суцільна лінія) доданками у варіаційній підстановці

Залежності mR_{cr} від ζ, отримані за допомогою варіаційного методу Канторовича з 1 та 2 доданками у пробній функції, зображені на рис. 1 штриховою та суцільною кривими, відповідно. Незважаючи на досить значні наближення, відмінності між цими кривими не перевищують 10 %, тому результати можна вважати задовільними. На тому ж рисунку для порівняння зображена штрих-пунктирна крива, отримана методом “зшивання” асимптот. Вона демонструє правильну якісну поведінку, але досить сильно відрізняється кількісно, а тому може слугувати лише для грубих оцінок. Разом з тим, це можна виправдати простотою її отримання у порівнянні з іншими методами. Як і очікувалося, всі криві прямують до нуля при наближенні сумарного заряду до $\zeta_c = \frac{1}{2}$. У такій границі навіть сумарний заряд обох домішок слабко перевищує критичне значення, а тому, очевидно, для досягнення надкритичної нестабільності їх треба розміщувати близько одна до одної. І навпаки, при $\zeta \to 1$ кожна з домішок несе майже критичний заряд, тому вони породжують атомний колапс навіть перебуваючи на великій відстані одна від одної.

Цікавою є отримана залежність критичної відстані від ширини квазічастинкової щілини в зонному спектрі графену. Оскільки в задачі є лише два розмірні параметри $m = \frac{\Delta}{\hbar v_F}$ і R, то в рівняння і в кінцевий результат вони входять лише у вигляді безрозмірної комбінації – добутку mR. Звідси слідує, що при фіксованому заряді домішок ζ критична відстань прямує до нескінченності при $m \to 0$. Тобто, у безщілинному випадку система переходить у надкритичний стан, коли сумарний заряд домішок перевищує критичне значення $\zeta_c = \frac{1}{2}$, незалежно від відстані між ними. Це також виглядає природним з тих міркувань, що у безщілинному випадку задача стає масштабно інваріантною і в ній зникає еталон довжини.

Разом з тим, у реальному графені завжди існують інші масштаби довжини. Передусім, це період кристалічної ґратки. Але більш важливе обмеження виникає, якщо врахувати екранування кулонівських домішок за рахунок поляризації. Хвильовий вектор Томаса-Фермі, що відповідає за екранування, має вигляд $q_{TF} = \frac{4\sqrt{\pi}\alpha}{\kappa}\sqrt{n}$, де n – концентрація носіїв заряду. Тому критична відстань для безмасових квазічастинок для зарядів $\zeta > \frac{1}{2}$ не перевищує масштабу екранування Томаса-Фермі $l_{TF} = \frac{1}{q_{TF}}$.

Як для масивних ($\Delta \neq 0$), так і для безмасових ($\Delta = 0$) квазічастинок у графені надкритична нестабільність супроводжується появою резонансів у нижньому континуумі. Енергію та ширину цих резонансів було обчислено у монопольному наближенні за допомогою методу ВКБ і вони мають вигляд (для кутового моменту $j = \frac{1}{2}$):

$$E(\zeta, R) = -\Delta \cdot \frac{\frac{R_{cr}}{R} + \frac{7}{12\zeta^2} - \frac{1}{3}}{\frac{2}{3} + \frac{7}{12\zeta^2}}, \tag{8}$$

$$\Gamma \propto \exp\left[-2\pi\left(\zeta\sqrt{\frac{E^2}{E^2 - \Delta^2}} - \sqrt{\zeta^2 - 1/4}\right)\right]. \tag{9}$$

З формул (8), (9) випливає, що при наближенні домішок на відстань, меншу за критичну, енергія зв’язаного стану перетинає значення $E = -\Delta$ і монотонно продовжує посуватися вглиб континууму вже у вигляді резонансу. По мірі заглиблення його ширина зростає.

У ***третьому розділі*** досліджується надкритична нестабільність для квазічастинок у графені зі щілиною в зонному спектрі в потенціалі електричного диполя, утвореного двома протилежно зарядженими домішками. Гамільтоніан має вигляд (1) з наступним потенціалом:

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{Ze^2}{\kappa}\left(\frac{1}{\sqrt{(x-R/2)^2+y^2+r_0^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x+R/2)^2+y^2+r_0^2}}\right), \qquad (10)$$

де r_0 – параметр регуляризації, який дозволяє уникнути явища “падіння на центр”.

Неважко побачити, що в даній задачі присутня симетрія зарядового спряження. Дійсно, оператор $\hat{U}_c = \hat{\tau}_x\hat{K}$, де $\hat{K}$ – комплексне спряження, переводить гамільтоніан задачі сам у себе зі зміною знаку:

$$\hat{U}_c\hat{H}\hat{U}_c^\dagger = -\hat{H}. \qquad (11)$$

Це означає, що спектр задачі буде симетричним відносно нуля енергії. Якщо два симетричні рівні наближаються один до одного, то зустрінуться вони в околі нульового значення енергії. Проте перетнутися вони не зможуть, оскільки мають однакову симетрію і теорема Вігнера-фон Неймана заборонить такий перетин.

Рівняння Дірака в даній задачі не допускає розділення змінних, тому використовуються наближені методи. Для обчислення спектру та хвильових функцій електрона в полі диполя застосовується метод лінійних комбінацій атомних орбіталей. У ролі базисних орбіталей обираємо хвильову функцію основного стану електрона у полі однієї додатно зарядженої домішки та зарядово спряжену до неї. Орбіталі центровані на відповідних домішках. Хвильову функцію

$$|\Psi\rangle = v_1|1\rangle + v_2|2\rangle \qquad (12)$$

підставляємо до рівняння Дірака $\hat{H}\Psi = E\Psi$ і по черзі проектуємо його на стани $|1\rangle$ і $|2\rangle$. У результаті отримуємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь на коефіцієнти $v_{1,2}$. З умови існування її нетривіального розв’язку маємо секулярне рівняння (використовуємо безрозмірні величини $\zeta = Ze^2/(\kappa\hbar v_F)$, $\varepsilon = E/\Delta$, $h_{ij} = H_{ij}/\Delta$):

$$\det\begin{vmatrix} h_{11}-\varepsilon & h_{12}-S\varepsilon \\ h_{21}-S^*\varepsilon & h_{22}-\varepsilon \end{vmatrix} = 0, \qquad (13)$$

де $h_{11} = -h_{22} = \varepsilon_0 + \zeta C$, $h_{12} = h_{21} = -\zeta A$, $S = \langle 1|2\rangle = 0$ – інтеграл перекриття, $C = \langle 1|\frac{1}{\sqrt{r_2^2+r_0^2}}|1\rangle$ – кулонівський інтеграл, $A = \langle 1|\frac{1}{\sqrt{r_1^2+r_0^2}}|2\rangle$ – обмінний інтеграл, ε_0 – енергія електрона у полі однієї додатної домішки з зарядом Z.

Тоді розв’язок секулярного рівняння (13) має вигляд:

$$\varepsilon = \pm\sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2} = \pm\sqrt{(\varepsilon_0 + \zeta C)^2 + (\zeta A)^2}, \qquad (14)$$

а коефіцієнти хвильової функції, що відповідає від’ємній гілці спектру, наступні:

$$v_1 = \frac{h_{12}}{\sqrt{(h_{12})^2 + \left(h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2}\right)^2}}, \qquad (15а)$$

$$v_2 = -\frac{h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2}}{\sqrt{(h_{12})^2 + \left(h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2}\right)^2}}. \qquad (15б)$$

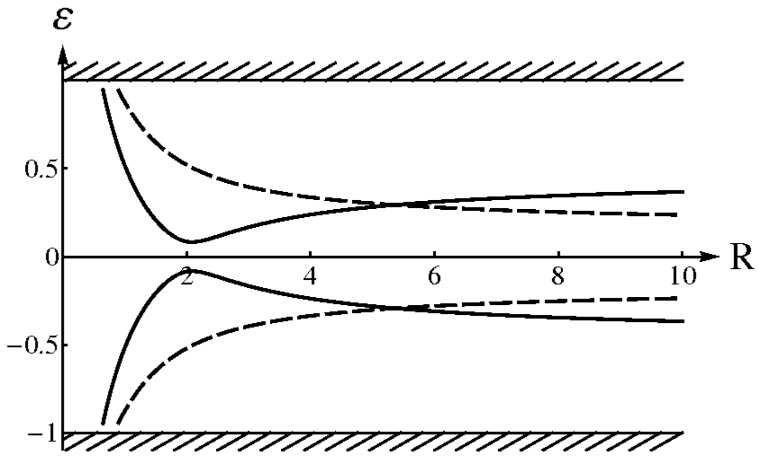

Рис. 2. Залежність енергії системи від відстані між домішками для двох різних значень заряду домішок: $\zeta = 0.65$ ($\varepsilon_0 > 0$) – штрихові криві та $\zeta = 0.85$ ($\varepsilon_0 < 0$) – суцільні криві

На рис. 2 наведені графіки енергії системи як функції відстані між домішками для двох значень заряду домішок: $\zeta = 0.65$ ($\varepsilon_0 > 0$) та $\zeta = 0.85$ ($\varepsilon_0 < 0$). Бачимо, що у другому випадку спектр має характерну перетяжку, при переході через яку хвильова функція змінює свою локалізацію з однієї домішки на іншу. Про це свідчить графік коефіцієнтів лінійної комбінації (15), наведений на рис. 3.

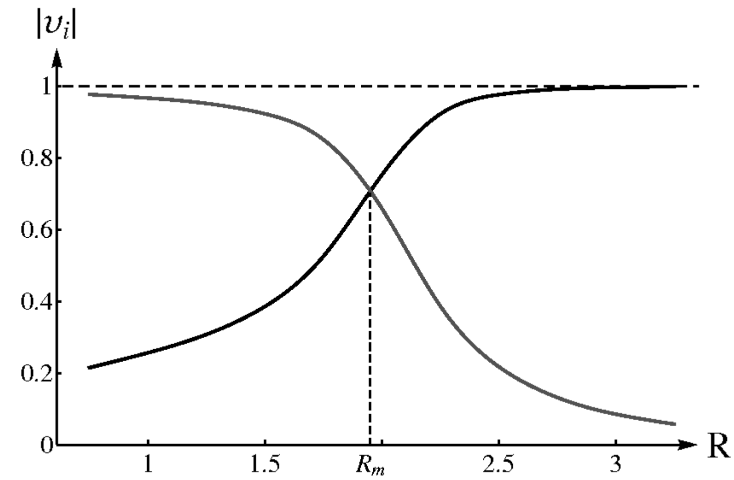

Рис. 3. Залежність модулів коефіцієнтів лінійної комбінації від відстані між домішками при $\zeta = 0.85$: $|v_1(R)|$ – зростаюча крива, $|v_2(R)|$ – спадна крива. Штриховкою позначено точку зміни локалізації $R_m \approx 1.95$

Метод ЛКАО є досить простим у реалізації і дозволяє більшість розрахунків проводити аналітично, хоча він незастосовний при малих відстанях між домішками. У цьому випадку енергія прямує до краю континууму, тому експоненційне загасання хвильових функцій має бути слабким. Натомість, пробна функція загасає за законом $\sim\exp\left(-\sqrt{1-\varepsilon_0^2}\cdot r\right)$, $r \to \infty$, тобто має неправильну асимптотику.

Альтернативно, проводяться розрахунки варіаційним методом Гальоркіна-Канторовича. Пробну функцію двох змінних шукаємо у вигляді розкладу в ряд за набором відомих функцій, які мають правильну асимптотику на нескінченності:

$$\phi(x,y) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2+y^2+r_0^2}}\left[\sum_{k=0}^{N} f_{2k}(x)y^{2k} + i\sum_{k'=1}^{N'} f_{2k'-1}(x)y^{2k'-1}\right], \quad (16а)$$

$$i\chi(x,y) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2+y^2+r_0^2}}\left[\sum_{k=0}^{N} g_{2k}(x)y^{2k} + i\sum_{k'=1}^{N'} g_{2k'-1}(x)y^{2k'-1}\right]. \quad (16б)$$

Підставимо ці вирази до лівої частини рівняння Дірака

$$\begin{cases} -i\left(\partial_x + i\partial_y\right)\phi + (v - \varepsilon - 1)\chi = 0, \\ -i\left(\partial_x - i\partial_y\right)\chi + (v - \varepsilon + 1)\phi = 0 \end{cases} \quad (17)$$

і будемо вимагати ортогональності відповідних нев'язок до базисних функцій за змінною y. У результаті отримаємо систему зчеплених звичайних диференціальних рівнянь на функції-коефіцієнти $f_i(x)$, $g_i(x)$, які розв'язуємо чисельними методами. Обираємо такі значення енергії, за яких розв'язки системи рівнянь обмежені на нескінченності.

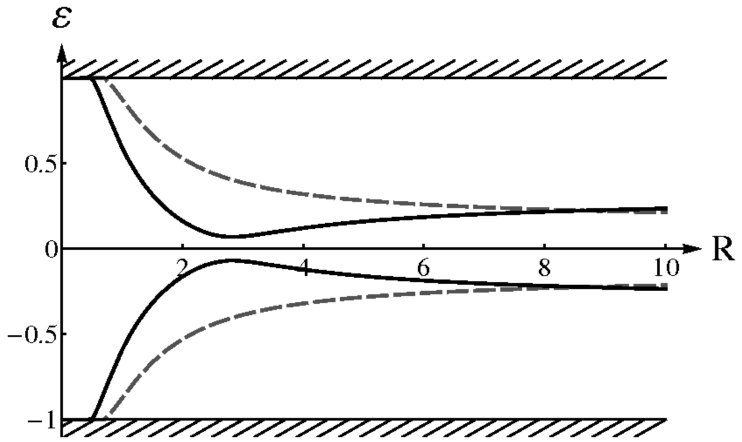

Рис. 4. Рівні енергії в задачі з диполем, обчислені варіаційним методом Гальоркіна-Канторовича з $N = 0$, $N' = 0$ (один доданок в анзаці) для різних значень зарядів домішок: $\zeta = 0.6$ – штрихові криві; $\zeta = 0.85$ – суцільні криві

Отримані таким способом рівні енергії у найпростішому наближенні методу Гальоркіна-Канторовича з $N = 0$, $N' = 0$, тобто з одним доданком в анзаці (16), зображені на рис. 4. Як бачимо, результати, отримані обома методами, як якісно, так і кількісно досить добре узгоджуються між собою (порівняйте рис. 2 і рис. 4).

Якщо заряд однієї додатної домішки є достатньо великим, щоб найнижчий зв'язаний стан електрона в її потенціалі перетинав рівень $E = 0$ (тобто разом рівні електрона в полі додатної домішки і дірки в полі від'ємної домішки перекривали інтервал 2Δ), то при поступовому збільшенні відстані між домішками рівні електрона і дірки спочатку виходять із відповідних континуумів і наближаються один до одного, прагнучи перетнутись, але в силу теореми Вігнера-фон Неймана не можуть цього зробити, а починають розходитися і згодом асимптотично прямують до рівнів у полі одного центра. Таким чином, спектр має характерну "перетяжку". При переході через неї хвильова функція електрона змінює свою локалізацію. Електрон на заповненому (нижньому) рівні мігрує з від'ємно зарядженого центра на додатно заряджений. Ефективно це виглядає так, ніби електрон, що вийшов з діраківського вакууму, локалізується на додатній домішці, екрануючи її, а біля від'ємної домішки локалізується дірка. Тобто, як і у традиційному випадку надкритичної нестабільності, народжується пара електрона і дірки, але в даній задачі кожен із них перебуває у зв'язаному стані з відповідною домішкою, частково екрануючи її. Якщо заряди домішок замалі, щоб рівні електрона і дірки разом перекрили інтервал енергії 2Δ, таких явищ не спостерігається. Тому надкритична нестабільність у полі диполя має пороговий характер.

Результати узагальнені на асиметричний випадок, коли заряди домішок є різнойменними і ще відрізняються за абсолютним значенням. Цим доведено універсальність явища зміни локалізації хвильової функції. Вона відбувається тоді, коли рівні енергії електрона і дірки разом перекривають всю масову щілину.

У ***четвертому розділі*** досліджуються особливості виникнення та можливості реалізації явища надкритичної нестабільності у системах, де існує лише дискретний спектр енергії електронів. До таких систем належать, зокрема, лист графену скінченних розмірів або графен у зовнішньому магнітному полі. У таких системах явище надкритичного атомного колапсу не може виникати в традиційному розумінні, коли зв'язаний стан електрона занурюється до нижнього континууму, тому що континууми відсутні. Натомість, при перевищенні зарядом домішки деякого критичного значення відбувається перегрупування енергетичних рівнів електрона, яке якісно схоже до утворення резонансу.

Розглянемо лист графену у вигляді круга деякого скінченного, але великого радіусу $R \gg \hbar v_F/\Delta \gg a$, де a – період кристалічної ґратки графену. У центрі цього круга розмістимо заряджену домішку, тоді і гамільтоніан, і граничні умови матимуть аксіальну симетрію. Тому зберігатиметься проекція кутового моменту на вісь симетрії. Це дозволить розділити змінні у цій задачі у полярній системі координат. Розв'язок рівняння Дірака $\widehat{H}\Psi = E\Psi$ з гамільтоніаном

$$\widehat{H} = -i\hbar v_F\left(\hat{\tau}_x\partial_x + \hat{\tau}_y\partial_y\right) + \Delta\cdot\hat{\tau}_z - \frac{Ze^2}{\kappa}\cdot\frac{1}{\sqrt{r^2+r_0^2}} \tag{18}$$

будемо шукати у вигляді:

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{-(m+1)\theta}f(r) \\ -ie^{-im\theta}g(r) \end{pmatrix}, \tag{19}$$

де m – квантове число кутового моменту. Граничні умови в нулі забезпечують регулярну поведінку хвильових функцій. Граничні умови на краю графенового листа оберемо у моделі Боголюбова, тобто вважатимемо, що за межами круга електрони мають дуже велику масу, що в границі $M \to \infty$ виражається простою умовою $(f+g)|_{r=R} = 0$. При виконанні цієї умови радіальна компонента струму через край листа дорівнює нулю $j_r = j_x\cos\theta + j_y\sin\theta = 0$, що цілком природно, оскільки електрони не можуть виходити за межі листа.

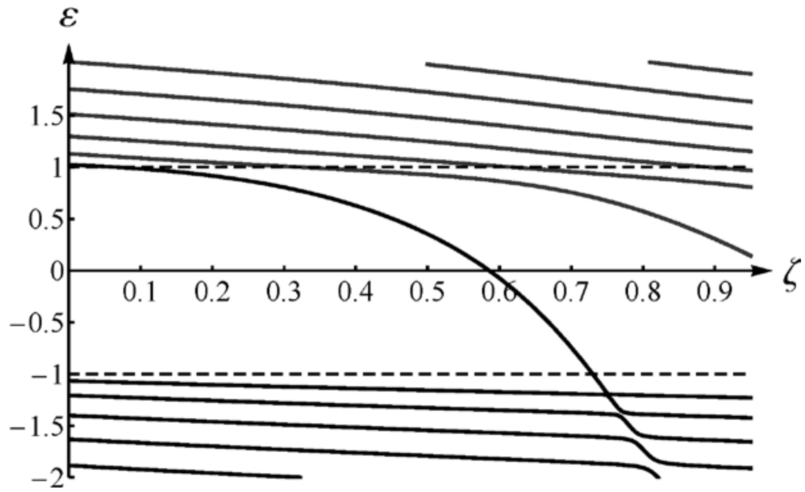

Рис. 5. Залежності енергій дискретних рівнів електрона в полі однієї домішки на обмеженому листі графену від її заряду. Використано наступні значення параметрів $r_0 = 0.01\hbar v_F/\Delta$, $R = 10\,\hbar v_F/\Delta$

Чисельне інтегрування рівняння Дірака із зазначеними вище умовами дає спектр задачі (зображений на рис. 5) та хвильові функції. Енергетичні рівні системи можна досить чітко розділити на верхній та нижній "квазіконтинууми" і один чи кілька відокремлених рівнів між ними. При поступовому збільшенні заряду домішки вони виходять із верхнього квазіконтинууму, зміщуються вниз і, врешті, зливаються з нижнім квазіконтинуумом. Якісно, це відповідає поведінці рівнів у традиційному варіанті явища. У момент приєднання дискретний рівень підходить впритул до верхнього рівня квазіконтинууму, але в силу того, що вони мають однакові квантові числа кутового моменту, їх перетин заборонений теоремою Вігнера-фон Неймана, тому вони не перетинаються, а розходяться, утворюючи перетяжку.

Після переходу через точку максимального зближення енергетичних рівнів усі рівні квазіконтинууму змінюють свою нумерацію на 1, бо до них згори приєднується ще один рівень. Але у кількох перших функцій нижнього квазіконтинууму з'являються гострі піки поблизу початку координат, які є результатом перерозподілу електронної густини, яка до цього локалізувалася на домішці. Це явище аналогічне утворенню резонансу в нижньому континуумі. При поступовому збільшенні заряду ці піки з'являються у все більш глибоко лежачих рівнів, що відповідає зміщенню резонансу углиб континууму.

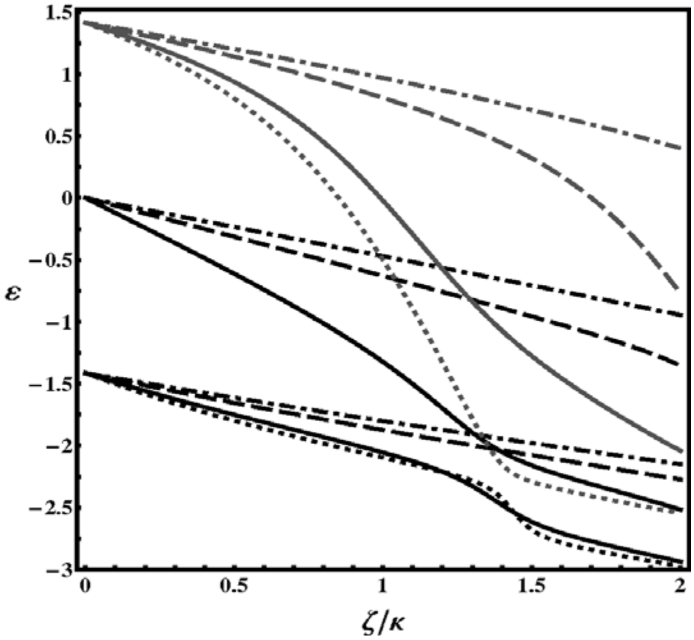

Рис. 6. Безрозмірні енергії рівнів Ландау $\varepsilon = El_B/(\hbar v_F)$ у безщілинному графені в магнітному полі $B = 10$ Тл як функції заряду домішки для різних квантових чисел m. Криві побудовані для трьох значень головного квантового числа: $n = +1$, $n = 0$ і $n = -1$. Квантовому числу кутового моменту відповідає тип кривої: $m = -1$ – пунктирні (лише для $n = +1$ та $n = -1$), $m = 0$ – суцільні, $m = 1$ – штрихові, $m = 2$ – штрих-пунктирні

За наявності зовнішнього магнітного поля, перпендикулярного до площини графену, електронний спектр перетворюється у набір дискретних рівнів Ландау. При цьому можна навіть не брати до уваги квазічастинкову щілину. Нею можна зовсім знехтувати у сильних магнітних полях, коли $\hbar v_F/l_B \gg \Delta$, де $l_B = \sqrt{\hbar c/|eB|}$ – т.зв. магнітна довжина. Тому гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{H} = v_F \hat{\boldsymbol{\tau}} \cdot \boldsymbol{\pi} - \frac{Ze^2}{\kappa} \cdot \frac{1}{\sqrt{r^2 + r_0^2}}, \qquad (20)$$

де $\boldsymbol{\pi} = -i\hbar\boldsymbol{\nabla} + \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$, а заряд електрона $-e < 0$. Потенціал домішки призводить до розщеплення рівнів Ландау за квантовим числом m. Виявляється, що і в цьому випадку спостерігаються ті ж явища, як для обмеженого листа графену (рис. 6).

Наявність зовнішнього магнітного поля дає спосіб ефективного регулювання сили потенціалу домішки за рахунок поляризаційних ефектів. Як було показано експериментально, екранування зарядженої домішки дуже сильно залежить від положення хімічного потенціалу, яке можна змінювати прикладанням напруги затвору. Щоб описати цей ефект теоретично, треба врахувати поляризацію в магнітному полі, яка призводить до появи індукованої густини зарядів. Її треба врахувати у рівнянні Пуассона:

$$\sqrt{-\Delta_{2D}}V_{tot}(\boldsymbol{x}) = -\frac{2\pi Ze^2}{\kappa}\delta^{(2)}(\boldsymbol{x}) - \frac{2\pi e^2}{\kappa}\int d^2\boldsymbol{y}\,\Pi^{(0)}(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mu)V_{tot}(\boldsymbol{y}), \qquad (21)$$

де оператор $\sqrt{-\Delta_{2D}}$ з'являється у рівнянні внаслідок розмірнісної редукції з тривимірного простору на двовимірний. Перший доданок у правій частині відповідає за густину заряду домішки, а другий – за густину індукованого заряду за рахунок поляризації. Розв'язуючи рівняння (21) за допомогою перетворення Фур'є, отримаємо наступний вираз для екранованого потенціалу домішки:

$$V_{tot}(\boldsymbol{x}) = -\frac{Ze^2}{\kappa}\int_0^{+\infty} dq\ \frac{q\,J_0(q|\boldsymbol{x}|)}{q + \frac{2\pi e^2}{\kappa}\Pi^{(0)}(0,q;\mu)}. \qquad (22)$$

Статична поляризаційна функція графену у зовнішньому магнітному полі має немонотонну поведінку при зміні хімічного потенціалу. Вона має гострі піки в околі $q = 0$, коли хімічний потенціал лежить всередині рівня Ландау, і прямує до нуля при $q = 0$, якщо він знаходиться між рівнями Ландау. Це якраз і визначає довгохвильову поведінку потенціалу домішки. Коли хімічний потенціал лежить всередині рівня Ландау, екранування є досить інтенсивним, тому ефективний заряд домішки значно зменшується. З іншої сторони, коли хімічний потенціал лежить між рівнями Ландау, екранування мінімальне і домішка значно впливає на спектр електронів. Це дає змогу регулювати силу потенціалу домішки, змінюючи положення хімічного потенціалу прикладанням до системи напруги затвору.

У ***висновках*** підсумовуються основні результати роботи.

ВИСНОВКИ

1. У найпростішому кластері з двох однойменно заряджених домішок обчислено критичну відстань, за якої дискретний рівень з найнижчою енергією занурюється до нижнього континууму і перетворюється в резонанс. Встановлено, що критична відстань зростає при збільшенні заряду домішок і при зменшенні ширини квазічастинкової щілини в зонному спектрі графену. У граничному випадку безщілинного графену надкритична нестабільність настає при перевищенні сумарним зарядом домішок критичного значення $2Z_c\alpha/\kappa = 1/2$, незалежно від відстані між ними. У надкритичному режимі при збільшенні заряду домішок або при зменшенні відстані між ними резонанс зміщується вглиб континууму і уширюється.
2. За допомогою техніки лінійних комбінацій атомних орбіталей та варіаційного методу Гальоркіна-Канторовича проведені розрахунки спектру та хвильових функцій електрона в полі електричного диполя, утвореного двома протилежно зарядженими домішками. Виявлено, що для достатньо великих зарядів домішок при збільшенні відстані між ними хвильова функція найвищого заповненого електронного стану змінює свою локалізацію з негативно зарядженої домішки на позитивно заряджену. Це явище є новим проявом надкритичної нестабільності, коли електрон та дірка народжуються з вакууму в зв'язаних станах з відповідними домішками. Результати узагальнено на асиметричний випадок, коли заряди домішок є різнойменними і відрізняються за абсолютним значенням.
3. У системах, де спектр електронів є виключно дискретним, було показано, що надкритична нестабільність також реалізується, але з певними відмінностями. При

досягненні критичного значення заряду один із дискретних рівнів наближається до нижнього "квазіконтинууму" і без перетину приєднується до нього. При цьому він перестає локалізуватися на домішці і його хвильова функція приймає вигляд, характерний для станів квазіконтинууму. Одночасно з цим, у кількох перших рівнів квазіконтинууму спостерігається збурення хвильових функцій у вигляді гострих піків поблизу початку координат. Це якісно повторює картину утворення резонансного стану у традиційному варіанті надкритичної нестабільності.

4. Враховано поляризаційні ефекти у магнітному полі, завдяки яким потенціал зарядженої домішки значно екранується. Показано, що екранування залежить від положення хімічного потенціалу: якщо він лежить всередині рівня Ландау, то поляризація дуже сильна і ефективний заряд домішки значно зменшується, якщо ж він знаходиться між рівнями Ландау, – екранування менш ефективне. Це дає змогу регулювати силу потенціалу домішки шляхом прикладання напруги затвору.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. *Sobol, O. O.* Supercritical instability in graphene with two charged impurities / O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // *Phys. Rev. B.* – 2013. – Vol. 88, Iss. 20. – P. 205116.

2. *Соболь, О. О.* Варіаційний метод обчислення критичної відстані в задачі двох кулонівських центрів у графені / О. О. Соболь // *Укр. Фіз. Журн.* – 2014. – Т. 59, № 5. – С. 534–543.

3. *Gorbar, E. V.* Supercritical electric dipole and migration of electron wave function in gapped graphene / E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, O. O. Sobol // *Europhys. Lett.* – 2015. – Vol. 111, No. 3. – P. 37003.

4. *Gorbar, E. V.* Supercriticality of novel type induced by electric dipole in gapped graphene / E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, O. O. Sobol // *Phys. Rev. B.* – 2015. – Vol. 92, Iss. 23. – P. 235417.

5. Screening of a charged impurity in graphene in a magnetic field / O. O. Sobol, P. K. Pyatkovskiy, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // *Phys. Rev. B.* – 2016. – Vol. 94, Iss. 11. – P. 115409.

6. *Соболь, О. О.* Дослідження нестабільності діраківського вакууму в задачі двох кулонівських центрів в графені / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Наук. конф. молодих вчених фізичного фак. до Днів Науки "Наука XXI сторіччя" : тези доп. – К., 2013. – С. 59.

7. *Соболь, О. О.* Надкритична нестабільність у графені з двома зарядженими домішками / О. О. Соболь, Е. В. Горбар // Тези доп. наук. конф. "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики". – К., 2014. – С. 78–79.

8. *Sobol, O. O.* Supercritical instability in graphene with two charged impurities / O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014) : book of abstracts. – L'viv : Eurosvit, 2014. – P. 278.

9. *Соболь, О. О.* Надкритична нестабільність у графені, індукована полем електрич-ного диполя / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Тези доп. наук. конф. "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики". – К., 2015. – С. 4.

АНОТАЦІЯ

Соболь О. О. Надкритична нестабільність у графені з зарядженими домішками. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2017.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню властивостей електронних станів у графені з зарядженими домішками. Зокрема, розглянуто явище надкритичної нестабільності, умови його виникнення та особливості прояву в системах домішок із зарядами одного та різних знаків. Для кластера з двох однакових домішок встановлено, що існує критична відстань між ними, при наближенні на яку виникає нестабільність. У потенціалі двох протилежно заряджених домішок знайдено новий прояв надкритичної нестабільності, коли електрон та дірка народжуються з вакууму в зв’язаних станах з відповідними домішками. Окрім того, досліджено можливість реалізації цього явища у системах, де спектр електронів є виключно дискретним: листі графену обмеженої площі та графені у зовнішньому магнітному полі. Шляхом урахування поляризаційних ефектів у магнітному полі обґрунтовано можливість регулювання ефективного заряду домішки за допомогою напруги затвору.

Ключові слова: графен, надкритична нестабільність, заряджена домішка, критична відстань, зміна локалізації хвильової функції, резонанс, екранування.

АННОТАЦИЯ

Соболь А. А. Надкритическая нестабильность в графене с заряженными примесями. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Институт теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова НАН Украины, Киев, 2017.

Диссертация посвящена теоретическому исследованию свойств электронных состояний в графене с заряженными примесями. В частности, рассмотрены явление надкритической нестабильности, условия его возникновения и особенности проявления в системах примесей с зарядами одного и различных знаков. Для кластера из двух одинаковых примесей установлено, что существует критическое расстояние между ними, при приближении на которое возникает нестабильность. В потенциале двух противоположно заряженных примесей найдено новое проявление надкритической нестабильности, когда электрон и дырка рождаются из вакуума в связанных состояниях с соответствующими примесями. Кроме того, исследована возможность реализации этого явления в системах, где спектр электронов является исключительно дискретным: листе графена ограниченной площади и графене во внешнем магнитном поле. Путем учёта поляризационных эффектов в магнитном поле обоснована возможность регулирования эффективного заряда примеси при помощи напряжения затвора.

Ключевые слова: графен, надкритическая нестабильность, заряженная примесь, критическое расстояние, изменение локализации волновой функции, резонанс, экранировка.

ABSTRACT

Sobol O. O. Supercritical instability in graphene with charged impurities. – Manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in speciality 01.04.02 – Theoretical physics. – Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2017.

The thesis is devoted to the theoretical study of the properties of electronic states in graphene with charged impurities. In particular, the phenomenon of supercritical instability and conditions of its appearance in the systems with similarly or oppositely charged impurities are investigated.

The supercritical instability in gapped graphene with two charged impurities separated by distance R is studied using the two-dimensional Dirac equation for electron quasiparticles. Attention is paid to a situation when charges of impurities are subcritical, whereas their total charge exceeds a critical one. The critical distance R_{cr} in the system of two charged centers is defined as that at which the electron bound state with the lowest energy reaches the boundary of the lower continuum. Since the variables in the Dirac problem with two Coulomb centers are not separable in any known orthogonal coordinate system, this problem does not admit an analytic solution. Therefore, a variational calculation of the critical distance R_{cr} separating the supercritical ($R < R_{cr}$) and subcritical ($R > R_{cr}$) regimes is carried out. It is shown that the critical distance R_{cr} increases as the quasiparticle gap decreases. For gapless quasiparticles as soon as the total charge of two impurities exceeds the critical one, the system is in the supercritical regime for any distance between the impurities. The transition to the supercritical regime is signaled by the appearance of quasistationary states in lower continuum. Since an analytic solution for quasistationary states cannot be found, it is used the Wentzel-Kramers-Brillouin method. A direct application of the WKB method to many-body systems which do not admit separation of variables is a complicated problem because it requires solving the corresponding partial differential equation. Therefore, the energy and width of a resonance as functions of the distance between two impurities are derived in the monopole approximation.

A new type of supercritical behavior in gapped graphene with two oppositely charged impurities is revealed by studying the two-dimensional Dirac equation for quasiparticles with the Coulomb potential regularized at small distances accounting the lattice effects. By utilizing the technique of linear combination of atomic orbitals and the variational Galerkin-Kantorovich method, it is shown that for supercritical electric dipole the wave function of the electron bound state changes its localization from the negatively charged impurity to the positively charged one as the distance between the impurities changes. Such a migration of the wave function corresponds to the electron and hole spontaneously created from the vacuum in bound states screening the positively and negatively charged impurities of the supercritical electric dipole, respectively. Obtained results are generalized to a particle-hole asymmetric case, where the charges of impurities differ in signs and absolute values, and it is demonstrated that the necessary energetic condition for the supercriticality of novel type to occur is that the energy levels of single positively and negatively charged impurities traverse together the energy distance separating the upper

and lower continua. The robustness of the supercriticality of novel type is confirmed by the study of an exactly solvable one-dimensional problem of the Dirac equation with the square well and barrier potential modeling an electric-dipole potential.

The supercritical instability in the field of a single charged impurity placed on the graphene flake of finite size is investigated. Boundary conditions at the edge of the flake are chosen in Bogolyubov model with infinite mass. Although the energy spectrum is purely discrete, the levels can be easily divided into upper and lower “quasicontinua” and one or more separate levels between them. When the charge of the impurity increases the levels separate from upper quasicontinuum, monotonically shift down and finally merge with the lower quasicontinuum. After this merging, the corresponding wave function is no longer localized on the impurity, but looks like the typical wave function of quasicontinuum. At the same time, the wave functions of the first few states of lower quasicontinuum undergo the perturbation: the sharp peaks appear near the origin. This qualitatively reproduces the pattern of formation of the resonance state in the traditional version of supercritical instability.

The electron states in the field of a charged impurity in graphene in a magnetic field are studied numerically. It is shown that a charged impurity removes the degeneracy of Landau levels converting them into band like structures. As the charge of impurity grows, the repulsion of sublevels of different Landau levels with the same value of orbital momentum takes place leading to the redistribution of the wave function profiles of these sublevels near the impurity. It is shown in agreement with the recent experiments that the effective charge of impurity can be very effectively tuned by chemical potential. To describe this phenomenon theoretically it is crucial to take into account the polarization in a magnetic field in the presence of chemical potential which is directly related to a gate voltage. It is determined numerically how the adiabatic increasing or diminishing of the impurity charge can be effectively accomplished by varying the chemical potential. As it is shown, the static polarization in a magnetic field strongly depends on the position of the chemical potential relative to the Landau levels. If the chemical potential is situated inside a Landau level, then the screening is very intense and the effective charge of the impurity is strongly reduced. In addition, a nonmonotonic momentum dependence of the static polarization function with a peak at $q = 0$ leads to oscillations of the screened potential with the sign change as a function of distance. On the other hand, if the chemical potential lies between Landau levels, then the screening is minimal and the impurity can significantly affect the electron spectrum.

Key words: graphene, supercritical instability, charged impurity, the critical distance, change of the location of the wave function, resonance, screening.

Соболь Олександр Олександрович

Надкритична нестабільність у графені з зарядженими домішками.
(Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук)

Підписано до друку 26.10.2017 р. Формат 60х90/16.
Ум. друк. арк. 0,9. Обл.-вид. арк. 0,9.
Тираж 100. Зам. 91.

«Видавництво “Науковий світ”»®
Свідоцтво ДК № 249 від 16.11.2000 р.
м. Київ, вул. Казимира Малевича (Боженка), 23, оф. 414.
200-87-15, 050-525-88-77
E-mail: nsvit23@ukr.net
Сайт: nsvit.cc.ua