Київський національний університет імені Тараса Шевченка Міністерство освіти і науки України

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

Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису

Соболь Олександр Олександрович

УДК 530.145, 538.915

ДИСЕРТАЦІЯ

НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ У ГРАФЕНІ З ЗАРЯДЖЕНИМИ ДОМІШКАМИ

01.04.02 – Теоретична фізика

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання чужих ідей, результатів і текстів мають посилання на відповідне джерело.

_____ О.О. Соболь

Науковий керівник: Горбар Едуард Володимирович, доктор фіз.-мат. наук, старший науковий співробітник

АНОТАЦІЯ

Соболь О. О. Надкритична нестабільність у графені з зарядженими домішками. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика». — Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Інститут теоретичної фізики ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ, 2017.

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню властивостей електронних станів у графені з зарядженими домішками. Розглянуто явище надкритичної нестабільності, умови його виникнення та особливості прояву в системах домішок із зарядами одного та різних знаків.

За допомогою аналізу розв'язків двовимірного рівняння Дірака для електронних квазічастинок досліджено надкритичну нестабільність у графені зі щілиною в квазічастинковому спектрі у полі двох однакових домішок, розміщених на відстані R. Увагу приділено ситуації, коли заряди кожної з домішок є докритичними, в той час як їх загальний заряд перевищує критичне значення. Критична відстань R_{cr} у системі двох заряджених центрів визначається як відстань, за якої зв'язаний стан електрона з найнижчою енергією досягає краю нижнього континууму. Змінні в рівнянні Дірака в потенціалі двох кулонівських центрів не розділяються в жодній ортогональній системі координат, тому аналітичний розв'язок задачі дуже складний. У зв'язку з цим проведено варіаційний розрахунок критичної відстані R_{cr} , що розділяє надкритичний $(R < R_{cr})$ та докритичний $(R > R_{cr})$ режими. Показано, що критична відстань зростає при зменшенні ширини квазічастинкової щілини. У випадку безцілинних квазічастинок при перевищенні сумарним зарядом критичного значення система переходить у надкритичний режим за будь-якої відстані між домішками. Перехід системи у надкритичний стан супроводжується появою квазістаціонарних станів у нижньому континуумі. Аналітичний розв'язок для квазістаціонарних станів також отримати неможливо, тому використано наближений метод Вентцеля-Крамерса-Бріллюена (ВКБ). Пряме застосування методу ВКБ до систем, що не допускають розділення змінних, є складною задачею, адже він передбачає розв'язання відповідних диференціальних рівнянь у частинних похідних. Тому енергія та ширина резонансу як функції відстані між домішками обчислені в монопольному наближенні.

Новий тип надкритичної поведінки у графені зі щілиною в квазічастинковому спектрі виявлено у системі двох протилежно заряджених домішок, що утворюють електричний диполь. Розглянуто двовимірне рівняння Дірака для електронних квазічастинок у полі домішок, кулонівський потенціал яких регуляризований на малих відстанях шляхом врахування ґраткових ефектів. За допомогою техніки лінійних комбінацій атомних орбіталей і варіаційного методу Гальоркіна-Канторовича показано, що у випадку надкритичного електричного диполя хвильова функція заповненого зв'язаного стану електрона змінює свою локалізацію з негативно зарядженої домішки на позитивно заряджену при поступовому збільшенні відстані між ними. Така міграція хвильової функції відповідає спонтанному народженню з вакууму пари електрона і дірки, що перебувають у зв'язаних станах з позитивною і негативною домішками, відповідно. Отримані результати узагальнено на асиметричний випадок, коли заряди домішок протилежні за знаком і різняться за абсолютним значенням. Показано, що необхідною енергетичною умовою для виникнення надкритичності нового типу є те, що рівні електрона в

полі однієї позитивно зарядженої домішки і дірки в полі однієї негативно зарядженої домішки разом перетинають ширину квазічастинкової щілини, що відокремлює верхній і нижній енергетичні континууми. Існування надкритичності нового типу було підтверджено під час вивчення точно розв'язуваної одновимірної задачі з рівнянням Дірака у потенціалі прямокутної ями і бар'єра, що моделюють електричний диполь.

Розглянуто надкритичну нестабільність у полі однієї зарядженої домішки, розміщеної на листі графену скінченних розмірів. Граничні умови на краю листа обрані у моделі Боголюбова з нескінченною масою. Незважаючи на те, що енергетичний спектр є виключно дискретним, рівні можуть бути умовно розділені на верхній і нижній "квазіконтинууми" і один чи декілька окремих рівнів між ними. Коли заряд домішки зростає, рівні відокремлюються від верхнього квазіконтинууму, монотонно зміщуються вниз і, нарешті, без перетину приєднуються до рівнів нижнього квазіконтинууму. Після цього приєднання відповідна хвильова функція більше не локалізована на домішці, а виглядає як типовий представник хвильових функцій квазіконтинууму. У той же час, хвильові функції перших декількох станів нижнього квазіконтинууму зазнають збурення: в них з'являються гострі піки поблизу початку координат. Це якісно відтворює картину формування резонансного стану в традиційному варіанті надкритичної нестабільності.

За допомогою чисельних методів досліджено електронні стани в полі зарядженої домішки в графені у магнітному полі. Показано, що заряджена домішка знімає виродження рівнів Ландау і перетворює їх у зоноподібні структури. При збільшенні заряду домішки спостерігається відштовхування підрівнів різних рівнів Ландау з тим же значенням орбітального моменту, що веде до перерозподілу профілів хвильових функцій цих підрівнів поблизу домішки. Показано, що ефективний заряд домішки можна змінювати, керуючи положенням хімічного потенціалу, що узгоджується з результатами нещодавніх експериментів. Для того, щоб описати це явище теоретично, враховано поляризацію графену в магнітному полі за наявності хімічного потенціалу, який безпосередньо пов'язаний з напругою затвору. Статична поляризація в магнітному полі сильно залежить від положення хімічного потенціалу відносно рівнів Ландау. Якщо хімічний потенціал знаходиться всередині рівня Ландау, то екранування дуже інтенсивне і ефективний заряд домішки сильно зменшується. Крім того, немонотонна залежність статичної поляризаційної функції від імпульсу з максимумом при q = 0 призводить до знакозмінних коливань екранованого потенціалу як функції відстані. З іншого боку, якщо хімічний потенціал лежить між рівнями Ландау, то екранування є мінімальним, і домішки можуть істотно впливати на електронний спектр системи.

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

Список публікацій:

- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Supercritical instability in graphene with two charged impurities", Phys. Rev. B 88, 205116 (2013).
- <u>О. О. Соболь</u>, "Варіаційний метод обчислення критичної відстані в задачі двох кулонівських центрів у графені", Укр. Фіз. Журн. **59** (5), 534 (2014).
- E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, <u>O. O. Sobol</u>, "Supercritical electric dipole and migration of electron wave function in gapped graphene", Europhys. Lett. **111**, 37003 (2015).

- E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, <u>O. O. Sobol</u>, "Supercriticality of novel type induced by electric dipole in gapped graphene", Phys. Rev. B 92, 235417 (2015).
- O. O. Sobol, P. K. Pyatkovskiy, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Screening of a charged impurity in graphene in a magnetic field", Phys. Rev. B 94, 115409 (2016).
- О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін, "Дослідження нестабільності діраківського вакууму в задачі двох кулонівських центрів в графені", Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету "Наука XXI сторіччя" (15–16 травня 2013 року). Тези доповідей (Київ, 2013), с. 59.
- О. О. Соболь, Е. В. Горбар, "Надкритична нестабільність у графені з двома зарядженими домішками", *Тези доповідей наукової конференції молодих вчених фізичного факультету "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики"* (Київ, 2014), с. 78–79.
- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Supercritical instability in graphene with two charged impurities", *International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014). Book of abstracts.* Ed. by O. Fesenko (Eurosvit, L'viv, 2014), p. 278.
- О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін, "Надкритична нестабільність у графені, індукована полем електричного диполя", *Тези* доповідей наукової конференції "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики" (Київ, 2015), с. 4–5.

SUMMARY

Sobol O. O. Supercritical instability in graphene with charged impurities. – Qualifying scientific work with the rights of manuscript.

Thesis for the Doctor of Philosophy degree (Candidate of science in Physics and Mathematics) in a speciality 01.04.02 "Theoretical physics". – Taras Shevchenko National University of Kyiv, Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, 2017.

The thesis is devoted to the theoretical study of the properties of electronic states in graphene with charged impurities. 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 (WKB). 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 electricdipole potential.

The supercritical instability in the field of a single charged impurity placed on the graphene flake of finite size is investigated. The 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 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, critical distance, change of the location of the wave function, resonance, quasicontinuum, polarization function.

List of publications:

- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Supercritical instability in graphene with two charged impurities", Phys.Rev. B 88, 205116 (2013).
- O. O. Sobol, "Variational method for the calculation of critical distance between two Coulomb centers in graphene", Ukr. Journ. Phys. 59 (5), 531 (2014).
- E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, <u>O. O. Sobol</u>, "Supercritical electric dipole and migration of electron wave function in gapped graphene", Europhys. Lett. **111**, 37003 (2015).
- 4. E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, <u>O. O. Sobol</u>, "Supercriticality of novel

type induced by electric dipole in gapped graphene", Phys. Rev. B **92**, 235417 (2015).

- O. O. Sobol, P. K. Pyatkovskiy, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Screening of a charged impurity in graphene in a magnetic field", Phys. Rev. B 94, 115409 (2016).
- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Investigation of the instability of Dirac vacuum in the problem of two Coulomb centres in graphene", *Scientific conference for young scientists of Physics Faculty "Science of XXI century"* (15–16 May 2013). Book of abstracts (Kyiv, 2013), p. 59 (in Ukrainian).
- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, "Supercritical instability in graphene with two charged impurities", Book of abstracts. Scientific conference for young scientists of Physics Faculty "Science of XXI century: modern problems in physics" (Kyiv, 2014), pp. 78–79 (in Ukrainian).
- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Supercritical instability in graphene with two charged impurities", *The International Summer School "Nanotechnology: From Fundamental Research to Innovations" and International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014). Book of abstracts.* Ed. by O. Fesenko (Eurosvit, L'viv, 2014), p. 278.
- O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, "Supercritical instability in graphene, induced by the field of electric dipole", *Book of abstracts. Scientific conference "Science of XXI century: modern problems in physics"* (Kyiv, 2015), pp. 4–5 (in Ukrainian).

3MICT

| Перелік скорочень | | | | |
|----------------------------------------------|--------|----------------------------------------------------------|----|--|
| Вступ | | | | |
| Розділ 1 Графен і надкритична нестабільність | | | | |
| 1.1 | Елект | гронні властивості графену | 25 | |
| 1.2 | Явищ | е надкритичної нестабільності | 29 | |
| 1.3 | Надкј | ритична нестабільність у магнітному | | |
| | полі | | 32 | |
| Розді | л 2] | Надкритична нестабільність у системі | | |
| дво | эх оді | накових домішок | 35 | |
| 2.1 | Вступ | Ι | 35 | |
| 2.2 | Поста | новка задачі | 36 | |
| 2.3 | Асими | птотика хвильової функції | 38 | |
| 2.4 | Bapia | ційний метод | 41 | |
| | 2.4.1 | Варіаційна підстановка з $N = 1 \dots \dots \dots \dots$ | 45 | |
| | 2.4.2 | Варіаційна підстановка з $N=2$ | 47 | |
| 2.5 | Метод | д ВКБ для обчислення енергії та ширини резонансу в | | |
| | НИЖН | ьому континуумі | 54 | |
| | 2.5.1 | Монопольне наближення | 54 | |
| | 2.5.2 | Обчислення енергії резонансу | 57 | |
| | 2.5.3 | Обчислення ширини резонансу | 59 | |
| 2.6 | Висно | овки до розділу 2 | 61 | |

| Розді | л 3 Надкритична нестабільність у системі | | | |
|-------------------------------|-------------------------------------------|-----|--|--|
| протилежно заряджених домішок | | | | |
| 3.1 | Вступ | 64 | | |
| 3.2 | Постановка задачі | 65 | | |
| | 3.2.1 Рівняння Дірака | 65 | | |
| | 3.2.2 Спрощена одновимірна модель | 68 | | |
| 3.3 | Техніка ЛКАО | 77 | | |
| | 3.3.1 Вибір атомних орбіталей | 77 | | |
| | 3.3.2 Пошук спектру та хвильових функцій | 80 | | |
| | 3.3.3 Аналіз результатів | 83 | | |
| 3.4 | Варіаційний метод | 88 | | |
| 3.5 | Асиметричний випадок | | | |
| 3.6 | Висновки до розділу З | | | |
| Розді | л 4 Надкритична нестабільність у системах | | | |
| iз д | цискретним спектром 1 | .00 | | |
| 4.1 | Вступ | 00 | | |
| 4.2 | Заряджена домішка на скінченному листі | | | |
| | графену | 01 | | |
| 4.3 | Заряджена домішка у магнітному полі 1 | 09 | | |
| 4.4 | Зміна ефективного заряду домішки за | | | |
| | рахунок поляризаційних ефектів | 15 | | |

Висновки

| Список використаних джерел | 135 |
|----------------------------|-----|
|----------------------------|-----|

133

додатки

| Додаток А Розв'язок рівняння Дірака для одно- | | | | | | |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|--|--|--|--|--|
| вимірної прямокутної потенціальної ями | 149 | | | | | |
| Додаток Б Математичний додаток | | | | | | |
| Б.1 Інтеграли | 152 | | | | | |
| Б.2 <i>G</i> -функція Мейєра | 155 | | | | | |
| Додаток В Список публікацій за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисер- | | | | | | |
| тації | 156 | | | | | |
| В.1 Список публікацій | 156 | | | | | |
| В.2 Апробація результатів дисертації | 157 | | | | | |

ПЕРЕЛІК СКОРОЧЕНЬ

- 2D двовимірний, має два просторових виміри
- 3D тривимірний, має три просторових виміри
- КЕД квантова електродинаміка
- КТП квантова теорія поля
- ВКБ метод Вентцеля-Крамерса-Бріллюена (квазікласичне наближення)
- ЛКАО техніка лінійних комбінацій атомних орбіталей
- ГК варіаційний метод Гальоркіна-Канторовича

ВСТУП

Актуальність теми. Експериментальне отримання графену в 2004 році [1] відкрило нову еру в фізиці конденсованого стану, довівши науковцям усього світу можливість існування двовимірних кристалів. Графен одразу привернув увагу вчених цілою низкою своїх унікальних властивостей: надвисокою міцністю, теплопровідністю, рухливістю носіїв заряду, які зумовили 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 [2,3], надкритичний атомний колапс [4–6] тощо.

Коли заряд ядра перевищує деяке критичне значення, в системі виникає нестабільність щодо народження електронно-позитронних пар [7]. Аналогічне явище в графені з зарядженою домішкою було теоретично передбачене через 3 роки після його отримання [4,5,8]. Але експеримент для його спостереження змогли поставити лише у 2013 році [6]. Учені з Каліфорнійського університету в якості заряджених домішок використали димери кальцію, які розмістили на листі графену. Як виявилося, заряду одного димера не вистачає для виникнення нестабільності, а домішки великого заряду дуже швидко рекомбінують, тому їх згрупували у кластери по 2 – 5 одиниць. Натомість, усі попередні теоретичні дослідження описували атомний колапс у потенціалі однієї домішки. Запитання, що стосуються особливостей виникнення нестабільності у кластерах заряджених домішок, залишаються відкритими.

Значно менше уваги в літературі приділено системам різнойменно заряджених домішок у графені. У роботах [9,10] розглядається поведінка рівнів енергії електрона в потенціалі точкового диполя, досліджуються особливості згущення рівнів поблизу країв континуумів. Але для експерименту більш важливим є випадок фізичного диполя, утвореного домішками протилежних зарядів, які розміщені на деякій скінченній відстані. Також залишається недослідженою можливість виникнення надкритичної нестабільності в такій системі.

Досить часто трапляються системи, у яких спектр електронів є виключно дискретним. Це, наприклад, лист графену обмеженої площі або графен у зовнішньому магнітному полі, яке перпендикулярне до його площини. Внесення зарядженої домішки в таку систему хоч і модифікує електронний спектр, але залишає його дискретним. У такому випадку стандартна схема виникнення нестабільності, коли найнижчий дискретний рівень електрона занурюється до нижнього континууму, не реалізується. Постають запитання, чи можливий в таких системах атомний колапс і який механізм його виникнення? Подібна задача для обмеженої (3+1)-вимірної системи розглядалася в [11], але жодних досліджень для планарних систем дотепер в літературі не було.

Однією з найбільших проблем експериментального спостереження явища надкритичної нестабільності є те, що заряд домішки можна змінювати лише дискретним чином. Це породжує значні труднощі, бо експериментатор має поступово додавати до кластера за допомогою щупа електронного мікроскопа по одній додатковій домішці, аж поки сумарний їх заряд не перевищить критичного значення. Однак у нещодавній роботі [12] була описана можливість плавної зміни ефективного заряду домішки у графені в магнітному полі шляхом прикладання напруги затвору. Таке регулювання сили потенціалу можливе завдяки поляризаційним ефектам. Незважаючи на те, що поляризаційна функція для графену в магнітному полі добре відома [13], її застосування для пояснення особливостей екранування домішок залишилося відкритою задачею.

Наявність відкритих запитань стосовно електронних властивостей графену, таких як умови виникнення та особливості спостереження явища надкритичної нестабільності в 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. Дисертаційна робота виконувалась на фізичному факультеті Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Результати дисертаційного дослідження було отримано на кафедрі квантової теорії поля у рамках наступних тем: у 2013 – 2015 рр. тема №06БФ051-06 "Дослідження в фізиці і астрофізиці високих енергій, фізиці елементарних частинок та конденсованого стану", науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Вільчинський Станіслав Йосипович; у 2016 – 2017 рр. тема №16БФ051-05 "Дослідження фундаментальних проблем фізики ядра, елементарних частинок та космомікрофізики", науковий керівник – д.ф.-м.н., проф. Каденко Ігор Миколайович.

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.

- 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'ектом 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 квазістаціонарного стану в надкритичному режимі був застосований метод Вентцеля-Крамерса-Бріллюена (ВКБ) у монопольному наближенні. Для знаходження спектру та хвильових функцій електрона у полі двох різнойменно заряджених домішок була використана техніка лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО), а також варіаційний метод Гальоркіна-Канторовича (ГК). При обчисленні спектру та хвильових функцій електрона на обмеженому листі графену граничні умови на краю листа було реалізовано за допомогою моделі Боголюбова з нескінченною масою. Ефекти екранування домішки в магнітному полі були враховані за допомогою однопетльової поляризаційної функції графену. Інтегрування усіх рівнянь руху здійснювалося чисельними методами.

Наукова новизна одержаних результатів. Основними науковими результатами, які виносяться на захист є такі:

- Досліджено явище надкритичної нестабільності у 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_cα/κ = 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. Результати дисертаційної роботи можуть бути використані при дослідженні низькоенергетичних властивостей графену, для підтвердження діраківської природи носіїв заряду в графені, для визначення меж застосовності континуального наближення. Аналітичні та чисельні розрахунки, проведені в роботі, можуть слугувати в якості теоретичного підґрунтя для майбутніх експериментів. Врахування поляризаційних ефектів у магнітному полі підтверджує можливість регулювання ефективного заряду домішки напругою затвору і таким чином дає можливість пояснити деякі експериментальні дані [12]. Отримані результати дозволяють здійснити широке узагальнення явища надкритичної нестабільності з випадку однієї зарядженої домішки, який уже був досліджений 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. Це дозволяє сформувати цілісну картину надкритичного атомного колапсу як квантового релятивістського явища.

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

- У роботі про два однойменно заряджені центри [14] здобувач обчислив залежність критичної відстані між домішками від їх заряду, а також провів аналітичні розрахунки енергії та ширини резонансу в надкритичному режимі.
- У роботі [15] дисертанту належить реалізація варіаційного методу Канторовича з двома доданками в анзаці для обчислення критичної відстані між домішками.
- У роботі про надкритичну нестабільність у потенціалі диполя [16] дисертант отримав спектр та хвильові функції електрона і дослідив їх залежність від відстані між домішками, які утворюють диполь.
- 4. У роботі [17] 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.

5. У роботі [18] 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 відділу теорії нелінійних процесів у конденсованих середовищах та відділу астрофізики і елементарних частинок Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України (Київ, 15 травня 2017 року). Також результати, отримані в дисертації, доповідались на наступних конференціях:

- Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems, Трієст, 2016, Італія.
- School and Workshop on Strongly Correlated Electronic Systems "Novel Materials and Novel Theories", Трієст, 2015, Італія.
- Наукова конференція "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики", Київ, 2015, Україна.
- 2nd International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014), Львів, 2014, Україна.
- Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики", Київ, 2014, Україна.
- Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя", Київ, 2013, Україна.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 9 робіт. Вони надруковані у провідних наукових журналах та працях конференцій, а саме: 5 з них видані у фізичних журналах [14–18], 1 з яких є самостійною, та 4 роботи у працях конференцій [19–22].

Структура дисертації та об'єм дисертації. Дисертація складається з анотації, вступу, чотирьох розділів, висновків, трьох додатків та списку використаних джерел, який містить 92 посилання. Дисертація включає 41 рисунок. Загальний об'єм дисертації 158 сторінок друкованого тексту.

РОЗДІЛ 1 ГРАФЕН І НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ

У цьому розділі наводяться основні відомості про графен та його електронні властивості, про явище надкритичної нестабільності та його зв'язок із фізикою графену.

1.1 Електронні властивості графену

Графен — це одна з алотропних модифікацій вуглецю, що являє собою один шар атомів, сполучених хімічними зв'язками в двовимірну ґратку, яка має вигляд бджолиних стільників. Його можна уявити як один окремо взятий шар графіту.

Незважаючи на те, що існування графену теоретично передбачалося ще досить давно [23,24], об'єктом активних досліджень він став лише нещодавно, з моменту його експериментального відкриття А. Геймом та К. Новосьоловим у 2004 році [1]. Він постійно привертає до себе увагу науковців усього світу завдяки своїм унікальним властивостям. Зокрема, він є одним із перших двовимірних кристалів, має надвисоку механічну міцність та рухливість носіїв заряду, чим обумовлені перспективи його застосування в новітній наноелектроніці. Також розгляд фізики графену є цікавим і з точки зору фундаментальних наукових досліджень. Адже, як виявилось, вона має глибинний зв'язок з квантовою електродинамікою (КЕД).

З кристалографічної точки зору, графен має трикутну ґратку Браве з двоточковим базисом [25–30]. Це означає, що є дві множини кристалографічно нееквівалентних вузлів, які утворюють дві підґратки. Найчастіше їх позначають *A* та *B*. До кожної елементарної комірки входить по



Рис. 1.1. Ґратка та елементарна комірка графену. Рисунок взято з роботи [26].

одному вузлу з кожної підґратки. Оскільки графен є двовимірним кристалом, то існує два лінійно незалежні базисні вектори, які породжують кожну з підґраток. Оберемо їх у вигляді:

$$\mathbf{a}_1 = a\left(\frac{1}{2}; \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \quad \mathbf{a}_2 = a\left(\frac{1}{2}; -\frac{\sqrt{3}}{2}\right),$$
 (1.1)

де $a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2| = \sqrt{3}a_{CC}$ – період ґратки, $a_{CC} \approx 1.42$ Å – відстань між найближчими сусідніми вузлами графену. Базисні вектори, а також елементарна комірка зображені на Рис. 1.1.

Обернена ґратка (див. Рис. 1.2) також має вигляд бджолиних стільників. Перша зона Бріллюена має шестикутну форму. Базисні вектори оберненої ґратки

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1; \frac{1}{\sqrt{3}} \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(1; -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) \tag{1.2}$$

задовольняють співвідношення $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{ij}$. Нееквівалентні кути першої зони Бріллюена позначаються точками K та -K (Інші позначення: K і K' або K_+ і K_-).

Атоми вуглецю в площині графену сполучені сильними ковалентними σ -зв'язками завдяки sp^2 -гібридизації атомних $2s, 2p_x, 2p_y$ орбіталей.



Рис. 1.2. Обернена ґратка та перша зона Бріллюена (зелений шестикутник). Рожевим виділено розширену зону Бріллюена. Рисунок взято з роботи [26].

Орбіталі 2*p_z* є перпендикулярними до площини і слабко перекриваються. Тому найпростіша модель опису графену — це наближення сильного зв'язку. Будемо враховувати можливість перескоку лише на найближчі сусідні вузли. Тоді в такому наближенні гамільтоніан набуде вигляду [26]:

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle,\sigma} (\hat{a}^{\dagger}_{\sigma,i} \hat{b}_{\sigma,j} + h.c.), \qquad (1.3)$$

де сумування ведеться по всіх сусідніх вузлах, t – амплітуда перескоку на найближчі сусідні вузли, $\hat{a}_{\sigma,i}^{\dagger}$, $\hat{a}_{\sigma,i}$, $\hat{b}_{\sigma,j}^{\dagger}$, $\hat{b}_{\sigma,j}$ – фермі-оператори народження/знищення для електронів зі спіном $\sigma = \downarrow$, \uparrow на підґратках A та B відповідно.

Зонний спектр, порахований за гамільтоніаном (1.3), має вигляд:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{1 + 4\cos^2\frac{k_x a}{2} + 4\cos\frac{k_x a}{2}\cos\frac{\sqrt{3}k_y a}{2}},$$
(1.4)

де знак "–" відповідає валентній зоні, знак "+" – зоні провідності. Початок відліку квазіімпульсу обрано в центрі першої зони Бріллюена. Цей спектр зображено на Рис. 1.3.

Бачимо, що валентна зона та зона провідності дотикаються у двох



Рис. 1.3. Зонна структура графену. Рисунок взято з роботи [31].

нееквівалентних кутах першої зони Бріллюена. Це так звані точки Дірака. Координати цих точок:

$$\mathbf{K}_{\pm} = \pm \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{3}; 0\right). \tag{1.5}$$

У околі точок Дірака спектр є лінійним:

$$\varepsilon(\mathbf{k} = \mathbf{K}_{\pm} + \mathbf{q}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|, \qquad v_F = \frac{3|t|a}{2\hbar},$$
(1.6)

тобто низькоенергетичні збудження в графені є ефективно безмасовими. Причому спектр цих збуджень на вигляд такий же, як і в звичайних ультрарелятивістських частинок, з єдиною відмінністю, що в ньому замість швидкості світла у вакуумі c фігурує швидкість Фермі v_F .

Таким чином, у неперервній границі маємо ефективну квантову теорію поля з (2 + 1)-вимірними діраківськими ферміонами, що взаємодіють зі звичайним тривимірним потенціалом Кулона ~ 1/r. Ці обставини свідчать про можливість твердотільної реалізації експериментів для спостереження таких явищ КЕД, як парадокс Клейна, ефект Швінгера (народження пар у сильному зовнішньому електричному полі), надкритичний атомний колапс та інші, які ще не спостерігалися в природі.

Чистий підвішений графен не має щілини у зонному спектрі, а тому належить до напівметалів. Проте ця обставина значно ускладнює створення на його основі транзисторів, оскільки вони мають значні струми утоку [1]. Щілину в зонному спектрі графену можна відкрити різними способами, наприклад, використанням специфічних підкладок (нітрид бору) [32–34], у зовнішньому магнітному полі внаслідок ефекту магнітного каталізу [35] або просто за рахунок квантово-розмірних ефектів при використанні графенових нанострічок [28].

1.2 Явище надкритичної нестабільності

Однією з перших перевірок, яку проходило кожне новостворене хвильове рівняння, завжди був спектр воднеподібного атома. Не стало винятком і рівняння Дірака, написане ним у 1928 році [36,37]. Того ж таки року Дарвін і Гордон [38,39] отримали рівні енергії для одноелектронного атома, ядро якого несе заряд *Ze*:

$$E = mc^{2} \left[1 + \frac{(Z\alpha)^{2}}{(\sqrt{(j+1/2)^{2} - (Z\alpha)^{2}} + n_{r})^{2}} \right]^{-\frac{1}{2}}, \qquad (1.7)$$

де j – квантове число повного кутового моменту, n_r – радіальне квантове число. Для основного стану j = 1/2, $n_r = 0$, тому $E_0 = mc^2\sqrt{1 - (Z\alpha)^2}$. Очевидно, що для надвеликих зарядів ядер $Z > \frac{1}{\alpha} \approx 137$ енергія основного стану стає уявною. Це явище назвали "падінням на центр" (аналогічне явище в нерелятивістській квантовій механіці описане в книзі [40, §35]).

I. Я. Померанчук та Я. А. Смородинський у 1945 році показали [7], що причиною падіння на центр є сингулярність точного потенціалу Кулона в початку координат. Розв'язок релятивістської задачі Кеплера з урахуванням скінченних розмірів атомного ядра показав, що при Z = 137 ніяких особливостей немає, основний рівень енергії монотонно спадає, перетинає нуль, а при перевищенні т.зв. критичного значення заряду ядра $Z_{\rm cr} \approx 170$ занурюється в нижній континуум і в системі виникає нестабільність по відношенню до народження електронно-позитронних пар [11,41]. Електрони заповнюють K-оболонку, частково екрануючи заряд ядра, а вільні позитрони летять на нескінченність. Однак ядер з таким зарядом не існує, тому ефект так і не був спостережений.

Згодом виникла ідея про лобові зіткнення ядер важких атомів, наприклад, урану [42–44]. У цьому випадку їх сумарний заряд перевищує критичний і існує така відстань між ядрами, за якої відбувається занурення найнижчого зв'язаного стану в нижній континуум. Ця відстань також називається критичною. На жаль, у релятивістській задачі двох центрів змінні не розділяються в жодній системі координат, а тому побудувати аналітичний розв'язок не вдається [11,41]. Проте, були проведені розрахунки за допомогою наближених методів квантової механіки, зокрема варіаційного [45], і було отримано залежності критичної відстані між ядрами від повного заряду системи.

Інтерес до проблеми надкритичної нестабільності значно зріс після експериментального відкриття графену. Для електронів у графені ефективна константа взаємодії (аналог сталої тонкої структури в КЕД) $e^2/(v_F\hbar) \approx 2,2$, де $v_F \approx c/300$ – швидкість Фермі. Ця обставина значно зменшує значення критичного заряду [4, 5, 46, 47]. Надкритична нестабільність у графені близько пов'язана з явищем екситонної нестабільності [8, 48, 49], наслідком якого є відкриття щілини в спектрі графену, що перетворює його з напівметалу в ізолятор [50–56].

Хоча, відповідно до теорії, надкритична нестабільність у графені повинна легко реалізовуватися навіть для одиничних домішок невеликого заряду, донедавна її експериментальне спостереження все ще було ілюзорним. По-перше, графен завжди знаходиться на підкладці з певною діелектричною проникністю, яка ефективно зменшує константу взаємодії. По-друге, в реальному експерименті досить важко створювати заряджені домішки із високим зарядом, тому що вони дуже швидко рекомбінують із електронами графену. Разом з тим, ці проблеми можна подолати, якщо розмістити декілька однозарядних домішок на певній невеликій ділянці графену. Саме такий підхід був нещодавно реалізований групою вчених із Каліфорнійського університету [6]. Вони використовували голку сканувального електронного мікроскопа для утворення кластерів із кількох заряджених димерів кальцію.

Надкритична нестабільність для димерів Ca у графені теоретично досліджувалася за допомогою теорії функціоналу густини та покращеної моделі Хюккеля у роботі [57]. Результати досить добре якісно узгоджуються з експериментом [6], але кількість димерів Ca, необхідна для досягнення надкритичної нестабільності, є дещо меншою. Це може бути пов'язано з тим, що автори не враховували наявності підкладки з нітриду бору.

Цікава задача про дві різнойменно заряджені домішки в графені нещодавно розглядалася в статтях [9, 10]. (Її (3+1)-вимірний аналог про рух електрона у полі електричного диполя також досліджувався дещо раніше в роботах [58, 59].) Шляхом розгляду рівняння Дірака для квазічастинок у графені в полі електричного диполя автори показують, що в цьому потенціалі виникають серії з нескінченної кількості енергетичних рівнів, які згущуються поблизу континуумів і мають ієрархію, що схожа до скейлінгу Єфімова у спектрі трьох ідентичних бозонів з короткосяжною взаємодією [60, 61]. Ці енергетичні рівні не занурюються в континууми при зростанні дипольного моменту, тому автори вирішили, що в цій задачі надкритична нестабільність не реалізується. Задача з електричним диполем, очевидно, має зарядову симетрію, і ця симетрія грає провідну роль, призводячи до симетричного розміщення енергетичних рівнів відносно нуля. Ця симетрія призводить до того, що електронний і симетричний йому дірковий стани можуть перетнутися лише при E = 0. Але такий перетин є неможливим, оскільки ці стани мають однакові квантові числа, тому діє теорема про неперетинання рівнів Вігнера-фон Неймана [62]. Дійсно, чисельні розрахунки спектру електрона в полі диполя, проведені в роботі [9], показують, що рівні з додатною і від'ємною енергією спочатку наближаються один до одного, а потім, переходячи через екстремум, починають віддалятися.

Теоретичний аналіз в роботах [9, 10] зосереджується на ідеалізованому випадку точкового електричного диполя, який неможливо реалізувати на експерименті. Це зумовлено тим, що відстані між домішками, які розміщені на листі графену завжди є скінченними, а їх заряди не можуть бути як завгодно великими, бо тоді ці домішки дуже швидко рекомбінували б із вільними носіями заряду, які завжди присутні у графені. Натомість, модель фізичного диполя, утвореного з двох домішок протилежного заряду дозволяє прослідкувати поведінку хвильової функції електрона при плавній зміні дипольного моменту. Дотепер ця задача ще не досліджувалася в літературі.

1.3 Надкритична нестабільність у магнітному полі

Магнітні поля та їх ефекти є всюдисущими у фізиці. Стани електронів у магнітному полі описуються нескінченно виродженими рівнями Ландау [40]. Усі електронні стани одного рівня Ландау мають однакову енергію, магнітне поле "сковує" кінетичну енергію цих електронів, створюючи ідеальні передумови для реалізації нових фаз речовини, породжених взаємодією. В якості прикладу досить згадати дробовий квантовий ефект Холла [63] і явище магнітного каталізу [35]. У силу вищезазначеного, цікаво подивитися, як магнітне поле впливає на явище надкритичного атомного колапсу [64–66].

Особливе значення має існування у безщілинному випадку нескінченно виродженого рівня Ландау з нульовою енергією. У такому разі як завгодно слабкий притягальний потенціал здатний породити зв'язані стани з від'ємною енергією. Натомість, за відсутності магнітного поля квазістаціонарні стани з від'ємною енергією можуть бути породжені домішкою із зарядом, що перевищує певне критичне значення. Слід відзначити, що цей результат являє собою квантовомеханічний одночастинковий аналог явища магнітного каталізу в графені.

За наявності зовнішнього магнітного поля явище надкритичної нестабільності можна розглядати навіть для безщілинного графену, адже спектр електрона тепер дискретний і континууми не змикаються між собою при нульовій енергії. Разом з тим, наявність лише дискретного спектру вимагає іншої інтерпретації явища. Раніше надкритична нестабільність наставала, коли найнижчий за енергією зв'язаний стан занурювався до нижнього континууму і перетворювався у резонанс, проявляючи нестійкість системи по відношенню до народження електронно-діркових пар. Зараз континууми відсутні, тому необхідний зовсім інший критерій виникнення зазначеної нестабільності. Таке запитання раніше не розглядалося в літературі, хоча відповідь на нього є дуже важливою для повного розуміння картини явища.

Електронні стани в потенціалі зарядженої домішки експериментально досліджувалися в роботах [12,67], де було показано, що силою потенціалу домішки можна керувати шляхом зміни заселеності рівня Ландау за допомогою напруги затвору. Коли заселеність рівня Ландау низька, екранування стає настільки ефективним, що домішка стає практично невидимою. З іншої сторони, якщо рівень заселений майже повністю, екранування стає слабким і потенціал домішки має максимальну силу, залишаючись ослабленим лише за рахунок діелектричної проникності графену і підкладки. У цьому режимі вперше експериментально спостерігалося розщеплення рівня Ландау у систему дискретних підрівнів завдяки зняттю виродження за орбітальним квантовим числом. Цей експеримент послужив мотивацією для дисертаційного дослідження, де, на відміну від більш ранніх теоретичних робіт [64–66,68–70], основна увага зосереджена на ролі поляризаційних ефектів.

РОЗДІЛ 2 НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ У СИСТЕМІ ДВОХ ОДНАКОВИХ ДОМІШОК

2.1 Вступ

Явище надкритичної нестабільності виникає у присутності зарядженої домішки, поміщеної на листі графену, якщо її заряд перевищує деяке, т. зв. критичне значення [4–6,8,71]. Але незважаючи на велике значення константи зв'язку, $\alpha = e^2/(\hbar v_F) \approx 2.2$, практично реалізувати надкритичний колапс поблизу лише однієї зарядженої домішки так і не вдалося [6]. Одна із причин – це наявність діелектричної підкладки, яка ефективно зменшує значення константи зв'язку, призводячи до збільшення критичного заряду в к разів. Без присутності цієї підкладки неможливо закріпити домішку на листі графену. Інша причина – нестійкість домішок великого заряду щодо рекомбінації. Графен має значну концентрацію вільних електронів, з якими домішки швидко рекомбінують. Тому експериментатори, як правило, мають справу з однозарядними домішками. Все це приводить до необхідності розгляду явища надкритичної нестабільності у системі кількох заряджених домішок, розміщених на листі графену. Теоретично ця задача раніше не розглядалася, хоча експеримент уже успішно проведений [6]. Це і зумовлює актуальність такого дослідження.

У цьому розділі розглядається найпростіший кластер із двох однакових заряджених домішок. Метою дослідження є визначення критичної відстані між домішками, за якої настає надкритичний колапс, її залежності від заряду домішок та від квазічастинкової щілини в спектрі графену, а також обчислення енергії та ширини квазістаціонарного стану, який виникає в нижньому континуумі після переходу в надкритичний режим.

Розділ побудований наступним чином. У підрозділі 2.2 сформульовано постановку задачі, окреслено теоретичну модель, в якій проводиться розгляд. У підрозділі 2.3 досліджено асимптотичну поведінку точного розв'язку рівняння Дірака поблизу домішок та на нескінченності, з умови гладкого "зшивання" цих асимптотик отримано наближене трансцендентне рівняння для критичної відстані. Підрозділ 2.4 присвячений більш точному розрахунку критичної відстані за допомогою варіаційного методу Канторовича. У підрозділі 2.5 проводиться обчислення енергії та ширини резонансу в нижньому континуумі, коли система перебуває у надкритичному режимі, за допомогою методу ВКБ. Нарешті, в підрозділі 2.6 наведені висновки до розділу.

2.2 Постановка задачі

У наближенні сильного зв'язку зонний спектр графену має валентну зону та зону провідності, які дотикаються у двох нееквівалентних точках оберненої кристалічної ґратки. Це т. зв. *точки Дірака* K_{\pm} . При цьому спектр низькоенергетичних збуджень є лінійним. Ефективний гамільтоніан, що описує електронні квазічастинкові збудження в околі точок Дірака має вигляд (2+1)-вимірного гамільтоніану Дірака. У випадку, коли між валентною зоною та зоною провідності існує квазічастинкова щілина, в гамільтоніані з'являється масовий доданок:

$$H = v_{\rm F} \boldsymbol{\tau} \boldsymbol{p} + \xi \Delta \tau_z + V(\mathbf{r}), \qquad (2.1)$$


Рис. 2.1. Електрон у полі двох кулонівських домішок

де p – канонічний імпульс, τ_i – матриці Паулі і Δ – напівширина квазічастинкової щілини. Цей гамільтоніан діє в просторі двокомпонентних спінорів $\Psi_{\xi s}$, що несуть долинний ($\xi = \pm$) та спіновий ($s = \pm$) індекси. За стандартною домовленістю, $\Psi_{+s}^T = (\psi_A, \psi_B)_{K+s}$, $\Psi_{-s}^T = (\psi_B, \psi_A)_{K-s}$, де A, B – відповідні підґратки гексагональної ґратки графену. Потенціал взаємодії має вигляд

$$V\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2}\right),\tag{2.2}$$

де $\kappa = (1 + \kappa_{sub})/2$ – діелектрична проникність графену і підкладки, $Z_{1,2}$ – заряди домішок, $r_{1,2} = |\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|$ – відстані від них до електрона (див. рис.2.1).

Оскільки потенціал від спіну не залежить, надалі спіновий індекс опускатимемо. Також вважатимемо, що електрон знаходиться біля точки Дірака \mathbf{K}_+ . Якщо він перебуває біля точки \mathbf{K}_- , то слід замінити скрізь Δ на $-\Delta$. У нещодавніх експериментах [6] розглядались однакові домішки, тому тут також покладемо $Z_1 = Z_2 = Z$.

Таким чином, рівняння Дірака для електрона у потенціалі двох за-

ряджених домішок має вигляд:

$$\left(v_{\mathrm{F}}\tau_{x}p_{x}+v_{\mathrm{F}}\tau_{y}p_{y}+\Delta\tau_{z}+V\left(\mathbf{r}\right)\right)\Psi(\mathbf{r})=E\Psi(\mathbf{r}).$$
(2.3)

Для двокомпонентного спінора $\Psi(\mathbf{r}) = (\phi, \chi)^T$ воно перепишеться так:

$$\begin{cases}
\left(E - V - \Delta\right)\phi + i\hbar v_{\rm F} \left(\frac{\partial}{\partial x} - i\frac{\partial}{\partial y}\right)\chi = 0, \\
\left(E - V + \Delta\right)\chi + i\hbar v_{\rm F} \left(\frac{\partial}{\partial x} + i\frac{\partial}{\partial y}\right)\phi = 0.
\end{cases}$$
(2.4)

Якщо виразити компоненту χ з другого рівняння системи (2.4), то отримаємо диференціальне рівняння другого порядку на другу компоненту ϕ :

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2)\phi + \frac{\frac{\partial V}{\partial x} - i\frac{\partial V}{\partial y}}{E - V + \Delta} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + i\frac{\partial \phi}{\partial y}\right) + \frac{(E - V)^2 - \Delta^2}{(\hbar v_{\rm F})^2}\phi = 0.$$
(2.5)

Надкритична нестабільність настає, коли найнижчий зв'язаний стан занурюється в нижній континуум, тобто $E = -\Delta$ [11,41]. У подальших розрахунках розглядатимемо лише таке значення енергії.

2.3 Асимптотика хвильової функції

Дослідимо асимптотичну поведінку хвильової функції при великих відстанях $r \to \infty$. У цьому наближенні потенціал має вигляд:

$$V(\mathbf{r}) = -\zeta \hbar v_{\rm F} \left(\frac{1}{r} + \frac{R^2}{4r^3} P_2(\cos\varphi) + O\left(\frac{1}{r^5}\right)\right), \qquad (2.6)$$

де $\zeta = 2Z\alpha/\kappa$, а $P_2(x)$ – поліном Лежандра другого степеня. Підставляючи його до рівняння (2.5) і залишаючи лише найбільш вагомі доданки, отримаємо:

$$\phi'' + \frac{2}{r}\phi' + \left(\frac{\zeta^2}{r^2} - \frac{2m\zeta}{r}\right)\phi = 0,$$
(2.7)

де $m = \Delta/(\hbar v_{\rm F})$ – обернена "комптонівська" довжина хвилі квазічастинки. Загасаючий на нескінченності розв'язок цього рівняння описується функцією Макдональда:

$$\phi(r) = C_1 r^{-1/2} K_{i\gamma}(\sqrt{8m\zeta r}), \quad \gamma = \sqrt{4\zeta^2 - 1}.$$
 (2.8)

Тоді, враховуючи асимптотичну поведінку функції Макдональда [72], матимемо:

$$\phi_{\text{asym}}(r) = C_1 r^{-3/4} \exp(-\sqrt{8m\zeta r}), \quad r \to \infty.$$
(2.9)

Щоб дослідити асимптотичну поведінку функції безпосередньо біля однієї з домішок, зручно перейти до еліптичної системи координат (ξ, η) :

$$\xi \equiv \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta \equiv \frac{r_1 - r_2}{R}.$$
 (2.10)

Нові координати змінюються в діапазонах:

$$1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le 1,$$

де в точках $\xi = 1, \eta = \pm 1$ розміщуються домішки.

Наближення до однієї з домішок означає малість величини $\xi^2 - \eta^2$. Перепишемо рівняння (2.5) в еліптичних координатах:

$$\begin{split} \left[\sqrt{\xi^2 - 1} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sqrt{\xi^2 - 1} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \sqrt{1 - \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\sqrt{1 - \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] \phi + \\ + \frac{\left[\xi^4 \eta + 3\xi^2 \eta^3 - 3\xi^2 \eta - \eta^3 - i\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} (\xi^3 + 3\xi\eta^2) \right]}{\xi(\xi^2 - \eta^2)^2} \times \\ \times \left[\left(\eta(\xi^2 - 1) + i\xi\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \\ + \left(\xi(1 - \eta^2) - i\eta\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + \left[\frac{\zeta^2 \xi^2}{(\xi^2 - \eta^2)} - 4\zeta m R \xi \right] \phi = 0, \end{split}$$

$$(2.11)$$

де враховано, що в нових координатах потенціал взаємодії має вигляд:

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{2\zeta v_{\rm F}\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)}.$$
(2.12)

Будемо шукати розв'язок рівняння (2.11) у вигляді $\phi(\xi,\eta) = \phi(\mu)$, де $\mu = \xi^2 - \eta^2 = 4r_1r_2/R^2$. Після такої підстановки залишимо лише найбільш вагомі доданки і отримаємо:

$$\frac{d^2\phi}{d\mu^2} + \frac{2}{\mu}\frac{d\phi}{d\mu} + \frac{\zeta^2}{4\mu^2}\phi = 0.$$
 (2.13)

Розв'язок цього рівняння, регулярний при $\mu \to 0$ має вигляд:

$$\phi_{\rm imp}(\mu) = C_2 \mu^{-\sigma/2}, \quad \sigma = 1 - \sqrt{1 - \zeta^2}.$$
 (2.14)

Беручи до уваги те, що змінна $\mu \simeq 4r^2/R^2$ при $r \to \infty$, перепишемо розв'язок (2.8) у вигляді:

$$\phi(\mu) = C_1 \mu^{-1/4} K_{i\gamma} (2\sqrt{m\zeta R} \mu^{1/4}). \qquad (2.15)$$

Зшиваючи розв'язки (2.14) і (2.15) в точці $\mu = 1$, можна отримати оцінку для критичної відстані $R_{\rm cr}$ як функції заряду ζ . Ця залежність задовольняє трансцендентне рівняння:

$$2\sqrt{1-\zeta^2} - 1 = 2\sqrt{m\zeta R} \frac{K'_{i\gamma}(2\sqrt{m\zeta R})}{K_{i\gamma}(2\sqrt{m\zeta R})}.$$
(2.16)

Його чисельний розв'язок зображено штрих-пунктирною лінією на рис. 2.2. В подальшому цю залежність буде уточнено за допомогою варіаційного методу.

2.4 Варіаційний метод

Як було зазначено вище, релятивістське рівняння Дірака для задачі двох кулонівських центрів не допускає розділення змінних в жодній ортогональній системі координат, а тому неможливо отримати його розв'язок в аналітичній формі. Для побудови наближеного розв'язку скористаємось, як і в 3D випадку [45], варіаційним методом. Як зазначено в роботі [73], найкращої точності варіаційний метод досягає тоді, коли його пробні функції задовольняють асимптотикам точного розв'язку поблизу заряджених домішок та на нескінченності. Зазначені асимптотики були знайдені в попередньому підрозділі.

Щоб поставити варіаційну задачу, достатньо помітити, що диференціальне рівняння (2.5) може бути отримане при дослідженні на екстремум наступного функціоналу:

$$S[\phi] = \int \left((E - V + \Delta)^{-1} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^2 - \frac{(E - V - \Delta)}{(\hbar v_{\rm F})^2} |\phi|^2 \right) dxdy$$
(2.17)

за умови збереження норми:

$$N = \int \Psi^* \Psi dx dy = \int \left[(E - V + \Delta)^{-2} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^2 + \frac{1}{(\hbar v_{\rm F})^2} |\phi|^2 \right] dx dy.$$
(2.18)

Означимо нове поле $\psi = W^{-1/2}\phi$, де $W = E - V + \Delta$. Тоді функціонал $S[\phi]$ може бути представлений у формі, характерній для нерелятивістської квантової механіки:

$$S[\psi] = \int \left\{ |\nabla \psi|^2 + 2\Im m \left(\psi^* \left[\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi \right] \right) + 2(U - \epsilon) |\psi|^2 \right\} dxdy,$$
(2.19)

де $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \epsilon_{ij} a_i b_j - z$ -компонента векторного добутку двох векторів, $\epsilon = (E^2 - \Delta^2)/(2\hbar^2 v_{\rm F}^2)$ – ефективна енергія, а ефективний потенціал Uмає вигляд:

$$U = \frac{EV}{(\hbar v_{\rm F})^2} - \frac{V^2}{2(\hbar v_{\rm F})^2} + \frac{\Delta V}{4W} + \frac{3}{8} \frac{(\mathbf{\nabla}V)^2}{W^2}.$$
 (2.20)

Другий доданок у функціоналі (2.19) описує псевдоспін-орбітальну взаємодію.

Норма набуває вигляду:

$$N = \int \left[|\nabla \psi|^2 + 2\Im m \left(\psi^* \left[\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi \right] \right) + \left(\frac{W^2}{v_F^2} + \frac{\Delta V}{2W} + \frac{5(\nabla V)^2}{4W^2} \right) |\psi|^2 \right] W^{-1} dx dy \quad (2.21)$$

і є важливою при виборі правильних граничних умов. Оскільки надалі будемо цікавитись випадком, коли найнижчий зв'язаний стан занурюється в нижній континуум, то покладемо $E = -\Delta$ ($\epsilon = 0$), W = -V.

У підрозділі 2.3 було встановлено, що точний розв'язок задачі в обох асимптотичних випадках (2.14) і (2.15) залежить лише від однієї змінної μ . А тому застосуємо варіаційний метод Канторовича (докладніше в розділі 3 огляду [73]), де в якості пробних функцій оберемо:

$$\psi = \sum_{k=1}^{N} \psi_k(\mu) \nu^{k-1}.$$
(2.22)

Тут $\psi_k(\mu)$ – набір невідомих функцій, $\nu = \nu(\xi, \eta)$ – фіксована функція координат, яка є незалежною до μ . В роботі [45] розглядались два варіанти вибору функції ν . Отримані результати були досить близькими, тому зупинимось на одному з варіантів: $\nu = \eta^2/(\xi^2 - \eta^2) = (r_1 - r_2)^2/4r_1r_2$.

Після підстановки (2.22) до функціоналу (2.19) він набуде наступно-

го вигляду:

$$S[\psi] = 4\sum_{k,l=1}^{N} \int d\mu d\nu \left[(\nabla \mu)^{2} \psi_{k}^{\prime} \psi_{l}^{*\prime} \nu^{k+l-2} + 2\nabla \mu \nabla \nu \Re e(\psi_{l}^{*} \psi_{k}^{\prime})(l-1) \nu^{k+l-3} - 2\left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \mu\right) \Im m(\psi_{l}^{*} \psi_{k}^{\prime}) \nu^{k+l-2} + \psi_{l}^{*} \psi_{k} \left[(\nabla \nu)^{2} (l-1)(k-1) \nu^{k+l-4} - i(l-k) \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \nu\right) \nu^{k+l-3} + 2U \nu^{k+l-2} \right] \right] |J| f(\mu,\nu),$$
(2.23)

де функції $\nabla \mu$, $\nabla \nu$, V, U виражаються в змінних μ , ν .

Оскільки $\mu\nu = \eta^2 < 1, \ \mu(\nu+1) = \xi^2 > 1,$ інтегрування в площині (μ,ν) здійснюється по криволінійному трикутнику:

$$\left(\frac{1}{\mu} - 1\right)\theta\left(1 - \mu\right) < \nu < \frac{1}{\mu},\tag{2.24}$$

що можна забезпечити функцією $f(\mu,\nu)$:

$$f(\mu,\nu) = \theta(1-\mu\nu)[\theta(1-\mu)\theta(\mu(\nu+1)-1) + \theta(\mu-1)].$$
(2.25)

Перепишемо в змінних (μ, ν) всі величини, що фігурують у функціоналі (2.23):

$$|J| = \frac{\mu R^2}{16} \frac{1}{\sqrt{\nu(\nu+1)(\mu+\mu\nu-1)(1-\mu\nu)}},$$
(2.26)

$$V(\mu,\nu) = -\frac{2v_F\zeta}{R}\sqrt{\frac{\nu+1}{\mu}},$$
 (2.27)

$$(\boldsymbol{\nabla}\mu)^2 = \frac{16}{R^2}(\mu + 2\mu\nu - 1), \qquad (2.28)$$

$$(\boldsymbol{\nabla}\nu)^2 = \frac{16\nu(\nu+1)}{\mu^2 R^2},\tag{2.29}$$

$$\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\mu}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\nu} = -\frac{16\nu(\nu+1)}{R^2},\tag{2.30}$$

$$\frac{\nabla V}{V} \times \nabla \mu = (\nabla \nu \times \nabla \mu) \frac{\partial \ln V}{\partial \nu} = \frac{8}{R^2 \mu} \frac{\sqrt{\nu(\mu + \mu\nu - 1)(1 - \mu\nu)}}{\sqrt{\nu + 1}}, \quad (2.31)$$
$$\frac{\nabla V}{V} \times \nabla \nu = (\nabla \mu \times \nabla \nu) \frac{\partial \ln V}{\partial \mu} = \frac{8}{R^2 \mu^2} \sqrt{\nu(\nu + 1)(\mu + \mu\nu - 1)(1 - \mu\nu)}, \quad (2.32)$$
$$U = \frac{1}{R^2} \left[2v_F \zeta m R \sqrt{\frac{\nu + 1}{\mu}} - 2\zeta^2 \frac{\nu + 1}{\mu} - \frac{4\nu + 1}{\mu} + \frac{3}{2} \frac{4\mu\nu^2 + 5\mu\nu + \mu - 1}{\mu^2(\nu + 1)} \right]. \quad (2.33)$$

Тепер можна здійснити інтегрування у функціоналі (2.23) за змінною ν , в результаті якого отримаємо функціонал уже від функцій лише однієї змінної μ :

$$S_{N}[\psi] = 4 \sum_{k,l=1}^{N} \int_{0}^{\infty} d\mu \left(P_{kl} \psi_{k}^{\prime} \psi_{l}^{*\prime} + Q_{kl} \psi_{k} \psi_{l}^{*} + R_{kl} \psi_{k}^{\prime} \psi_{l}^{*} + R_{kl}^{\dagger} \psi_{k} \psi_{l}^{*\prime} \right),$$
(2.34)

де $\mathbf{\hat{P}}, \mathbf{\hat{Q}}$ та $\mathbf{\hat{R}}$ - матриц
і $N \times N,$ що залежать від $\mu:$

$$P_{kl}(\mu) = \int_{0}^{\infty} (\nabla \mu)^2 \nu^{k+l-2} |J| f(\mu,\nu) d\nu, \qquad (2.35)$$

$$Q_{kl}(\mu) = \int_{0}^{\infty} \left[(\nabla \nu)^{2} (l-1)(k-1)\nu^{k+l-4} - i(l-k) \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \nu \right) \nu^{k+l-3} + 2U\nu^{k+l-2} \right] |J| f(\mu,\nu) d\nu, \quad (2.36)$$

$$R_{kl}(\mu) = \int_{0}^{\infty} \left[\nabla \mu \nabla \nu (l-1) \nu^{k+l-3} + i \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \mu \right) \nu^{k+l-2} \right] |J| f(\mu,\nu) d\nu.$$
(2.37)

Функціонал (2.34) досягає свого мінімуму на розв'язках рівнянь Лагранжа-Ейлера ($l = \overline{1,N}$):

$$\frac{d}{d\mu}\left(P_{kl}\frac{d\psi_k}{d\mu} + R_{kl}^{\dagger}\psi_k\right) - Q_{kl}\psi_k - R_{kl}\frac{d\psi_k}{d\mu} = 0.$$
(2.38)

Граничні умови обираються так, щоб норма залишалася скінченною, а також з того, що пробні функції мають задовольняти асимптотикам точного розв'язку. Набір рівнянь Лагранжа-Ейлера та граничних умов до них формують разом крайову задачу, яку необхідно розв'язати.

2.4.1 Варіаційна підстановка з N = 1

У найпростішому випадку N = 1 матимемо одне диференціальне рівняння:

$$\frac{d}{d\mu} \left(P \frac{d\psi}{d\mu} \right) - Q\psi = 0. \tag{2.39}$$

Функція $R_{11}(\mu) \equiv R(\mu)$ не фігурує в цьому рівнянні, бо має лише уявну частину. Її можна відкинути, бо ми шукаємо хвильову функцію основного стану системи, яку можна обрати дійсною. Функція $P(\mu) = \pi \mu$, а $Q(\mu)$ виражається через повні еліптичні інтеграли першого та другого роду:

$$Q(\mu) = -\frac{\pi(\zeta^2 - 1)}{8\mu} + \frac{\zeta mR}{2} \left[\theta(1 - \mu)K(\sqrt{\mu}) + \frac{\theta(\mu - 1)}{\sqrt{\mu}}K\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right) \right] + \theta(1 - \mu) \left[\frac{3}{8\mu(1 + \mu)}E(\mu) - \frac{(2\zeta^2 + 1)(1 + \mu)}{8\mu}K(\mu) \right] + \theta(\mu - 1) \left[\frac{3}{8(1 + \mu)}E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \frac{(\zeta^2 - 1)(1 + \mu) + 3\mu}{4\mu^2}K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right].$$
(2.40)

Ця функція має логарифмічну особливість при $\mu = 1$. Асимптотичні вирази для неї при малих та великих значеннях аргументу мають

наступний вигляд:

$$Q(\mu) \simeq \begin{cases} \frac{\pi(1-\zeta^2)}{4\mu}, & \mu \to 0, \\ \pi\left(\frac{\zeta mR}{4\sqrt{\mu}} + \frac{1-4\zeta^2}{16\mu}\right), & \mu \to \infty. \end{cases}$$
(2.41)

З урахуванням цих виразів, рівняння (2.39) можна розв'язати в областях $\mu \ll 1$ та $\mu \gg 1$. Відповідні розв'язки, регулярні при $\mu = 0$ і загасаючі при $\mu \to \infty$ мають наступний вигляд:

$$\psi(\mu) = C_1 \mu \sqrt{1-\zeta^2/2}, \qquad \mu < 1,$$
 (2.42)

$$\psi(\mu) = C_2 K_{i\gamma} \left(2\sqrt{\zeta m R} \mu^{1/4} \right), \quad \gamma = \sqrt{4\zeta^2 - 1}, \qquad \mu > 1.$$
 (2.43)

Вони узгоджуються з формулами (2.14) та (2.15). Підстановка $\psi = \mu^{-1/2} \chi$ зводить рівняння (2.39) до вигляду рівняння Шрединґера з нульовою енергією:

$$-\chi''(\mu) + V_{\text{eff}}(\mu)\chi(\mu) = 0, \quad V_{\text{eff}}(\mu) = -\frac{1}{4\mu^2} + \frac{Q(\mu)}{\pi\mu}.$$
 (2.44)

Ефективний потенціал $V_{\text{eff}}(\mu)$ має широкий додатний бар'єр, завдяки доданку, що пропорційний до ζmR . Це і пояснює експоненційне загасання хвильової функції (2.43) при великих значеннях аргументу μ .

Диференціальне рівняння (2.39) визначає хвильову функцію критичного зв'язаного стану, який щойно занурився до нижнього континууму енергій. Це рівняння разом із асимптотиками (2.42) та (2.43) утворюють крайову задачу, що дозволяє визначити критичну відстань $R_{\rm cr}$ між двома зарядженими домішками як функцію їх заряду ζ . Оскільки функція $Q(\mu)$ виражається лише через повні еліптичні інтеграли, диференціальне рівняння (2.39) не може бути розв'язане аналітично. Тому ми розв'язуємо це рівняння чисельно, використовуючи "шутінг"-метод (англ.

shooting method – метод пострілів). Для цього ми фіксуємо значення хвильової функції та її похідної при певному малому значенні аргументу μ , відповідно до формули (2.42). Далі, для фіксованого ζ ми чисельно інтегруємо рівняння (2.39) для різних значень mR (тобто здійснюються "постріли" з початку координат вздовж характеристики даного рівняння, це пояснює назву методу). Зауважимо, що диференціальне рівняння (2.39) є лінійним, а тому значення нормувальної сталої C_1 є неважливим і воно буде визначене з умови нормування після розв'язання крайової задачі. Тому для простоти чисельного аналізу оберемо $C_1 = 1$. Слід підкреслити, що відстань між домішками входить у рівняння через функцію $Q(\mu)$ і лише в добутку mR, тому змінювати ці 2 параметри окремо не має сенсу (це наслідок того, що в задачі більше немає параметрів розмірності довжини; якщо розглядати регуляризований потенціал домішок, то з'явиться ще один розмірний параметр – радіус "обрізання" потенціалу r_0 , тому матимемо вже 2 безрозмірні комбінації з цих 3-х величин). Критична відстань $R_{\rm cr}$ (для заданого m) визначається як таке значення R, при якому розв'язок рівняння (2.39) прямує до нуля на нескінченності ("постріл" влучний). Повторюючи цю процедуру для різних значень параметра ζ , отримаємо залежність критичної відстані від заряду домішок. Цю залежність зображено на Рис. 2.2 синьою штриховою лінією.

2.4.2 Варіаційна підстановка з N = 2

Більшої точності можна досягти, застосовуючи варіаційний метод Канторовича із N > 1. Однак тут існують деякі відмінності від розглянутого в попередньому пункті випадку N = 1. Насамперед, уже не можна застосовувати шутінг-метод, бо маємо справу не з одним, а з системою диференціальних рівнянь. В [74] зазначено, що для полегшення чисельних розрахунків слід звести систему диференціальних рівнянь другого порядку до матричного диференціального рівняння першого порядку за допомогою наступної підстановки:

$$\psi_i'(\mu) = \sum_{j=1}^N Y_{ij}(\mu)\psi_j(\mu).$$
(2.45)

Тоді отримаємо нелінійне матричне рівняння Ріккаті на матрицю $\hat{\mathbf{Y}}$:

$$\hat{\mathbf{Y}}' = \hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}^2, \qquad (2.46)$$

де матриці-коефіцієнти мають вигляд:

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}^{-1}(\hat{\mathbf{Q}} - \hat{\mathbf{R}}'), \qquad (2.47)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{P}}^{-1} (\hat{\mathbf{R}} - \hat{\mathbf{R}}^T + \hat{\mathbf{P}}'). \qquad (2.48)$$

Як і в попередньому випадку, матриці **Ŷ**, **Q**, **R̂** можна виразити через повні еліптичні інтеграли першого та другого роду (див. Додаток Б.1) і мають наступний вигляд:

$$P_{11}(\mu) = \pi\mu, \qquad (2.49a)$$

$$P_{12}(\mu) = P_{21}(\mu) = \frac{\pi}{2}(1-\mu) + \theta(1-\mu)\left[2E(\mu) - (1-\mu^2)K(\mu)\right] + \theta(\mu-1)\mu\left[2E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1-\frac{1}{\mu^2}\right)K\left(\frac{1}{\mu}\right)\right], \qquad (2.496)$$

$$P_{22}(\mu) = \frac{\pi}{2}\frac{1-\mu+\mu^2}{\mu} + \theta(1-\mu)\frac{1-\mu}{\mu}\left[2E(\mu) - (1-\mu^2)K(\mu)\right] + \theta(\mu-1)(1-\mu)\left[2E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1-\frac{1}{\mu^2}\right)K\left(\frac{1}{\mu}\right)\right], \qquad (2.49b)$$

$$R_{11}(\mu) = R_{21}(\mu) = 0,$$

$$R_{12}(\mu) = -\frac{\pi}{2} - \theta(1-\mu) \frac{E(\mu)}{2} -$$
(2.50a)

$$-\theta(\mu-1)\left[E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1 - \frac{1}{\mu^2}\right)K\left(\frac{1}{\mu}\right)\right], \qquad (2.506)$$

$$R_{22}(\mu) = -\frac{\pi(2-\mu)}{4\mu^2} - \theta(1-\mu) \left[\frac{3-\mu}{2\mu^2}E(\mu) - \frac{1-\mu^2}{2\mu^2}K(\mu)\right] - \theta(\mu-1) \left[\frac{3-\mu}{2\mu}E\left(\frac{1}{\mu}\right) + \frac{(\mu-1)(\mu^2-\mu-2)}{2\mu^3}K\left(\frac{1}{\mu}\right)\right], \quad (2.50\text{B})$$

$$Q_{11}(\mu) \equiv Q(\mu), \quad \text{див. рівняння (2.40)}, \quad (2.51a)$$

$$Q_{12}(\mu) = Q_{21}(\mu) = -\frac{\pi \left(3\mu + 4(\zeta^2 - 1)\right)}{32\mu^2} + \theta(1 - \mu)\frac{\zeta mR}{2\mu}E(\sqrt{\mu}) + \theta(\mu - 1)\frac{\zeta mR}{2\sqrt{\mu}}\left[E\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right) - \frac{\mu - 1}{\mu}K\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right)\right] - \theta(1 - \mu)\left[\frac{3\mu + 2(\mu + 1)(\zeta^2 - 1)}{8\mu^2(1 + \mu)}E(\mu) + \frac{3(1 - \mu)}{16\mu}K(\mu)\right] - \theta(\mu - 1)\left[\frac{3\mu + 2(\mu + 1)(\zeta^2 - 1)}{8\mu(1 + \mu)}E\left(\frac{1}{\mu}\right) + \frac{(1 - \mu)\left(9\mu + 4(1 + \mu)(\zeta^2 - 1)\right)}{16\mu^3}K\left(\frac{1}{\mu}\right)\right], \quad (2.516)$$

$$Q_{22}(\mu) = \frac{\pi}{32\mu^3} \left(16 - (2\zeta^2 - 2 + 3\mu)(2 - \mu) \right) + \\ +\theta(1 - \mu) \frac{\zeta mR}{6\mu} \left[2 \left(\frac{2}{\mu} - 1 \right) E(\sqrt{\mu}) - \left(\frac{1}{\mu} - 1 \right) K(\sqrt{\mu}) \right] + \\ +\theta(\mu - 1) \frac{\zeta mR}{6\sqrt{\mu}} \left[2 \left(\frac{2}{\mu} - 1 \right) E\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}} \right) - \left(1 - \frac{1}{\mu} \right) \left(\frac{3}{\mu} - 2 \right) K\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}} \right) \right] + \\ +\theta(1 - \mu) \left[\frac{(1 - \mu) \left(2(\zeta^2 - 1)(\mu + 1) - 3\mu(1 - \mu) \right)}{16\mu^3} K(\mu) + \\ + \frac{3\mu^2 + 13\mu + 16 + 2(\zeta^2 - 1)(\mu^2 - 2\mu - 3)}{16\mu^3(1 + \mu)} E(\mu) \right] + \\ +\theta(\mu - 1) \left[\frac{(1 - \mu)[3\mu^2 + 5\mu + 8 + (\zeta^2 - 1)(\mu^2 - \mu - 2)]}{8\mu^4} K\left(\frac{1}{\mu} \right) + \\ + \frac{3\mu^2 + 13\mu + 16 + 2(\zeta^2 - 1)(\mu^2 - 2\mu - 3)}{16\mu^2(1 + \mu)} E\left(\frac{1}{\mu} \right) \right].$$
(2.51b)

Матриці $\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{R}}$ є сингулярними в нулі та нескінченності. Це відображає той факт, що різні функції $\psi_k(\mu)$ (як і різні елементи матриці $\hat{\mathbf{Y}}$) мають різні степені зростання/спадання в особливих точках. Для подолання цієї незручності здійснимо лінійне перетворення пробних функцій:

$$\psi_k(\mu) = S_{kl}(\mu)\tilde{\psi}_l(\mu), \quad \det \mathbf{\hat{S}}(\mu) \neq 0.$$
(2.52)

Означимо нову матрицю $\mathbf{\hat{Y}}_{\mathbf{S}}$:

$$\tilde{\psi}_k'(\mu) = (Y_\mathbf{S})_{kl} \,(\mu) \tilde{\psi}_l(\mu). \tag{2.53}$$

Вона пов'язана з матрицею $\hat{\mathbf{Y}}$ наступним співвідношенням:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{Y}} \hat{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{S}}'. \qquad (2.54)$$

Матриця $\mathbf{\hat{Y}}_{\mathbf{S}}$ також задовольняє рівнянню Ріккаті:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}' = \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{S}} \hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^2. \tag{2.55}$$

Закони зміни коефіцієнтів рівнянь (2.55) та (2.38) при перетворенні (2.52) мають наступний вигляд:

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{B}} \hat{\mathbf{S}}' - \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{S}}'', \qquad (2.56)$$

$$\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{B}} \hat{\mathbf{S}} + 2 \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{S}}'', \qquad (2.57)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}},\tag{2.58}$$

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}}', \qquad (2.59)$$

$$\hat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}'^T \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{R}}^T \hat{\mathbf{S}}' + \hat{\mathbf{S}}'^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}}'.$$
(2.60)

З них випливає критерій вибору матриці $\hat{\mathbf{S}}$: після перетворення матриця $\hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{S}}$ має бути невиродженою (оскільки повинна існувати її обернена).

У околі кожної з особливих точок $\mu = 0$ і $\mu \to \infty$ слід обрати свою матрицю перетворення $\hat{\mathbf{S}}^{0/\infty}$, перетворені матриці-коефіцієнти $\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{S}}$ слід розкласти за степенями змінної μ . Відповідно, і невідому матрицю $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}$ слід шукати у вигляді:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{(0)} = \mu^{\lambda_0} \left(\hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)} + \mu \hat{\mathbf{Y}}_2^{(0)} + \mu^2 \hat{\mathbf{Y}}_3^{(0)} + \ldots \right), \quad \mu \to 0,
\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{(\infty)} = \mu^{\lambda_\infty} \left(\hat{\mathbf{Y}}_1^{(\infty)} + \frac{1}{\mu} \hat{\mathbf{Y}}_2^{(\infty)} + \frac{1}{\mu^2} \hat{\mathbf{Y}}_3^{(\infty)} + \ldots \right), \quad \mu \to \infty. \quad (2.61)$$

У результаті такої підстановки до рівняння (2.55) і прирівнювання числових коефіцієнтів при однакових степенях змінної μ отримаємо ланцюжок пов'язаних лінійних алгебраїчних рівнянь на матриці $\hat{\mathbf{Y}}_2, \hat{\mathbf{Y}}_3,...,$ але на матрицю $\hat{\mathbf{Y}}_1$ матимемо квадратне рівняння вигляду:

$$\hat{\mathbf{Y}}_1^2 - \hat{\mathbf{B}}_1 \hat{\mathbf{Y}}_1 - \hat{\mathbf{A}}_1 = 0, \qquad (2.62)$$

де $\hat{\mathbf{A}}_1, \hat{\mathbf{B}}_1$ - деякі числові матриці. У випадку N = 2 вдається добрати такі матриці перетворення $\hat{\mathbf{S}}^{0/\infty}$, щоб $\hat{\mathbf{B}}_1 = B_1 \hat{\mathbf{1}}$. Тоді квадратне матричне рівняння вдається розв'язати. З двох коренів слід обрати той, який відповідає більш регулярній поведінці пробних функцій в околі особливих точок (додатній в околі $\mu = 0$ і від'ємний в околі $\mu \to \infty$). Показники степеня $\lambda_{0/\infty}$ обирають таким чином, щоб забезпечити збіг степенів найбільш вагомих доданків в обох частинах рівняння. Таким способом знайдемо початкові умови на матрицю $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}$ в нулі та на нескінченності:

1. Інтервал $0 < \mu \leq 1$

det
$$\hat{\mathbf{P}}(\mu) = \frac{\pi^2 \mu^2}{8} + O(\mu^4), \quad \mu \to 0.$$
 (2.63)

Тому матрицю $\hat{\mathbf{S}}^{(0)}$ слід обрати таку, щоб det $\hat{\mathbf{S}}^{(0)} \sim \frac{1}{\mu}$. Оберемо її в наступному вигляді:

$$\hat{\mathbf{S}}^{(0)}(\mu) = \begin{pmatrix} \frac{\mu-1}{\mu^{3/2}} & \frac{\mu+1}{\mu^{3/2}} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu}} & -\frac{1}{\sqrt{\mu}} \end{pmatrix}, \quad \det \hat{\mathbf{S}}^{(0)} = -\frac{2}{\mu}.$$
(2.64)

Показник степеня $\lambda_0 = -1$, що відповідає степеневій поведінці пробних функцій в околі точки $\mu = 0$. Коефіцієнти рівняння (2.62) мають вигляд:

$$\hat{\mathbf{A}}_{1}^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{3-\zeta^{2}}{4} & -\frac{3}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1-\zeta^{2}}{4} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{1}^{(0)} \equiv \hat{\mathbf{1}}.$$
(2.65)

Рівняння (2.62) зводиться до такого вигляду:

$$\left(\hat{\mathbf{Y}}_{1}^{(0)} - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{1}}\right)^{2} = \hat{\mathbf{A}}_{1}^{(0)} + \frac{1}{4}\hat{\mathbf{1}}, \qquad (2.66)$$

його розв'язок:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{1}^{(0)} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}} + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{1-\zeta^{2}}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{5-\zeta^{2}}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \frac{4+\sqrt{1-\zeta^{2}}+3\sqrt{5-\zeta^{2}}}{8} & \frac{3\sqrt{1-\zeta^{2}}-3\sqrt{5-\zeta^{2}}}{8} \\ \frac{\sqrt{1-\zeta^{2}}-\sqrt{5-\zeta^{2}}}{8} & \frac{4+3\sqrt{1-\zeta^{2}}+\sqrt{5-\zeta^{2}}}{8} \end{pmatrix}.$$
(2.67)

Матриця $\frac{1}{\mu} \hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)}$ використовується в якості початкової умови при чисельному інтегруванні рівняння Ріккаті (2.55) на інтервалі $0 < \mu \leq 1$.

2. Інтервал $1 \leq \mu < \infty$

$$\det \mathbf{\hat{P}}(\mu) = \frac{\pi^2}{8} + O\left(\frac{1}{\mu^2}\right), \quad \mu \to \infty, \tag{2.68}$$



Рис. 2.2. Залежності $mR_{\rm cr}(\zeta)$, отримані з чисельного розв'язку наближеного рівняння (2.16) (чорна штрих-пунктирна лінія) та за допомогою варіаційного методу Канторовича з N = 1 (синя штрихова лінія) та N = 2 (червона суцільна лінія).

тому матрицю $\hat{\mathbf{S}}^{(\infty)}$ слід обрати таку, щоб det $\hat{\mathbf{S}}^{(\infty)} \sim 1$.

Оберемо її в наступному вигляді:

$$\mathbf{\hat{S}}^{(\infty)}(\mu) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\mu}} & -\frac{1}{\sqrt{\mu}} \\ \sqrt{\mu} & \sqrt{\mu} \end{pmatrix}, \quad \det \mathbf{\hat{S}}^{(\infty)} = 2.$$
(2.69)

Показник степеня $\lambda_{\infty} = -3/4$, що відповідає поведінці пробних функцій ~ $\exp(-\mu^{1/4})$ при $\mu \to \infty$. Коефіцієнти рівняння (2.62) мають вигляд:

$$\hat{\mathbf{A}}_{1}^{(\infty)} = \frac{\zeta m R}{4} \hat{\mathbf{1}}, \quad \hat{\mathbf{B}}_{1}^{(\infty)} \equiv \hat{\mathbf{0}}.$$
(2.70)

Розв'язок рівняння (2.62) має вигляд:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{1}^{(\infty)} = -\frac{\sqrt{\zeta mR}}{2} \hat{\mathbf{1}}.$$
(2.71)

Матриця $\frac{1}{\mu^{3/4}} \mathbf{\hat{Y}}_1^{(\infty)}$ використовується в якості початкової умови при чисельному інтегруванні рівняння Ріккаті (2.55) на інтервалі $1 \leq \mu < \infty$.

Після вибору початкових умов відбувається чисельне інтегрування рівнянь Ріккаті методом Рунге-Кутти в областях $\mu \in [0,1]$ $\mu \in [1,\infty)$. Обчислюються значення матриць $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{0/\infty}(\mu = 1)$. Потім слід здійснити обернені перетворення і знайти матриці $\hat{\mathbf{Y}}^{0/\infty}(\mu = 1)$.

Умовою гладкого зшивання пробних функцій в областя
х $\mu>1$ та $\mu<1$ є:

$$\delta(mR_{\rm cr},\zeta) \equiv \det[\mathbf{\hat{Y}}^0(\mu=1) - \mathbf{\hat{Y}}^\infty(\mu=1)] = 0.$$
 (2.72)

Усі перераховані вище маніпуляції слід проробити для різних значень добутку mR при фіксованому значенні ζ . Таке значення $mR_{\rm cr}$, при якому виконано умову (2.72), вважається критичним. За результатами чисельних розрахунків побудовано криву залежності $mR_{\rm cr}(\zeta)$ (суцільна червона лінія на рис. 2.2).

2.5 Метод ВКБ для обчислення енергії та ширини резонансу в нижньому континуумі

У цьому підрозділі досліджується квазістаціонарний стан у графені з двома однаковим зарядженими домішками. Обчислюються його енергія та ширина. Оскільки аналітичний розв'язок для квазістаціонарного стану знайти неможливо, застосовується метод ВКБ. Безпосереднє застосування цього методу до систем, які не допускають розділення змінних, є складною задачею, тому що вимагає розв'язання відповідних диференціальних рівнянь у частинних похідних. Тому застосуємо монопольне наближення, як це було зроблено в роботах [73,75] у випадку задачі двох заряджених центрів у (3 + 1)-вимірній КЕД.

2.5.1 Монопольне наближення

Для відстаней r > R (точніше $r \gg R$) потенціал задачі двох центрів близький до сферично симетричного. Тому можна розглянути одну заряджену домішку із зарядом 2Ze і обмежити розгляд лише на область $r \ge \varkappa R$, де $\varkappa \sim 1$ – деяка безрозмірна константа. Таке наближення відоме як *монопольне* і також розглядається в роботах [76,77]. Виявляється, що всі результати для енергії та ширини резонансу практично не будуть залежати від точного значення сталої *ж*.

У випадку сферично симетричного потенціалу шукатимемо розв'язки рівняння Дірака (2.3) у наступному вигляді:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\sqrt{\pi r}} \left(\begin{array}{c} (1+i)F(r)e^{i(j-1/2)\varphi} \\ (1-i)G(r)e^{i(j+1/2)\varphi} \end{array} \right),$$
(2.73)

де $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ – квантове число повного кутового моменту. Тоді рівняння (2.3) зводиться до наступної системи:

$$\begin{pmatrix} F'(r) \\ G'(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{\hbar v_F} \begin{pmatrix} \frac{\hbar v_F j}{r} & \Delta + E - V(r) \\ \Delta - E + V(r) & -\frac{\hbar v_F j}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(r) \\ G(r) \end{pmatrix}.$$
(2.74)

Здійснюючи в цій системі рівнянь підстановку

$$\chi_1(r) = (E + \Delta - V(r))^{-1/2} F(r), \quad \chi_2(r) = (E - \Delta - V(r))^{-1/2} G(r) \quad (2.75)$$

і виражаючи χ_2 через χ_1 , отримаємо наступне диференціальне рівняння другого порядку для функції $\chi \equiv \chi_1$:

$$\chi'' + \frac{E^2 - \Delta^2 - U}{\hbar^2 v_F^2} \chi = 0, \qquad (2.76)$$

де

$$U(r,E) = 2EV - V^2 + \hbar^2 v_F^2 \left(\frac{j(j-1)}{r^2} + \frac{V''}{2W} + \frac{3}{4}\frac{V'^2}{W^2} + \frac{j}{r}\frac{V'}{W}\right) \quad (2.77)$$

 $i W = E + \Delta - V(r).$

Відповідно до методу ВКБ, рівнянню (2.76) відповідає наступний

квазікласичний імпульс радіального руху:

$$p(r,E) = \frac{1}{v_F} \sqrt{E^2 - \Delta^2 - U(r,E)}.$$
(2.78)

Оскільки нас цікавить область енергій $E \leq -\Delta$, означимо безрозмірний параметр $y = -(E + \Delta)r/(\hbar v_F \zeta)$, який є малим у зазначеній області. Тоді $W = \frac{\hbar v_F \zeta}{r}(1-y)$. Для того, щоб покращити точність квазікласичного аналізу в області малих r, додамо поправку Лангера [78], яка полягає в заміні $j(j-1) \rightarrow (j-1/2)^2$. Тоді для квазікласичного імпульсу матимемо наступний вираз:

$$p(r) = \frac{\hbar}{r} \left[\zeta^2 - (j - 1/2)^2 + \frac{2E\zeta r}{\hbar v_F} + \frac{(E^2 - \Delta^2)r^2}{\hbar^2 v_F^2} + \frac{1 - j}{1 - y} - \frac{3}{4(1 - y)^2} \right]^{1/2}.$$
 (2.79)

Розкладаючи його в ряд по *y* і обмежуючись лише доданками до другого порядку, отримаємо

$$p(r) \simeq \frac{\hbar}{r} \left\{ a - 2br + cr^2 + O\left[(E + \Delta)^3 \right] \right\}^{1/2},$$
 (2.80)

де коефіцієнти а, b, c мають вигляд:

$$a = \zeta^{2} - j^{2}, \quad b = \frac{\zeta}{\hbar v_{F}} \left[\Delta - \left(1 + \frac{1+2j}{4\zeta^{2}} \right) (E+\Delta) \right],$$

$$c = \frac{E^{2} - \Delta^{2}}{\hbar^{2} v_{F}^{2}} - \frac{(j+5/4)(E+\Delta)^{2}}{\hbar^{2} v_{F}^{2} \zeta^{2}}.$$
(2.81)

Для енергій поблизу границі нижнього континууму $E \lesssim -\Delta$ і $\zeta > |j|$ ці коефіцієнти є додатними, тому класично заборонена область знаходиться при $r_{-} < r < r_{+}$, де $p^{2}(r)$ від'ємний. Класичні точки повороту $r_{\pm} = (b \pm \sqrt{b^{2} - ac})/c$ визначаються з умови $p(r_{\pm}, E) = 0$ і залежать від енергії *E*. Квазічастинки з довжиною хвилі де Бройля, меншою за r_{-} , можуть бути захоплені в області $r < r_{-}$ і їх час життя визначається тунелюванням через бар'єр.

2.5.2 Обчислення енергії резонансу

Для знаходження енергії квазістаціонарного стану використаємо умову квантування Бора–Зоммерфельда:

$$\int_{\varkappa R/2}^{r_{-}} p(r,E)dr = \pi\hbar n, \qquad (2.82)$$

де n = 1, 2... Нижня межа інтегрування $\varkappa R/2$ пов'язана з розміром квазімолекули, а безрозмірна константа \varkappa , як зазначалося раніше, визначає точність монопольного наближення.

При $E = -\Delta$ і n = 1 умова квантування (2.82) стає рівнянням на критичну відстань $R_{\rm cr}$. У цьому випадку точка повороту має дуже простий вигляд $r_{-}^0 = r_{-}(E = -\Delta) = \hbar v_{\rm F}(\zeta^2 - j^2)/(2\zeta\Delta)$. Здійснюючи інтегрування, отримаємо наступне рівняння:

$$\ln\frac{1+\xi}{1-\xi} - 2\xi = \frac{\pi}{\sqrt{\zeta^2 - j^2}}, \quad \xi = \sqrt{1 - \frac{\zeta R_{\rm cr} \Delta \varkappa}{\hbar v_F (\zeta^2 - j^2)}}.$$
 (2.83)

Враховуючи, що монопольне наближення добре працює лише в слабко надкритичному випадку ($\zeta \gtrsim |j|$), де параметр $\xi \sim 1$, можна наближено розв'язати рівняння і отримати для критичної відстані наближену формулу

$$\frac{R_{\rm cr}\Delta}{\hbar v_{\rm F}} = \frac{4(\zeta^2 - j^2)}{\zeta \varkappa} \exp\left(-\frac{\pi}{\sqrt{\zeta^2 - j^2}} - 2\right), \quad \zeta > |j|, \qquad (2.84)$$

яка добре узгоджується з попередніми результатами в зазначеній області $\zeta \gtrsim |j|$ (в попередніх підрозділах розглядався основний стан, для якого j = 1/2).

Щоб отримати залежність енергії квазістаціонарного стану від відстані між домішками E(R), застосуємо умову квантування (2.82) двічі, для $E = -\Delta$, n = 1, $R = R_{\rm cr}$ і для довільного $R < R_{\rm cr}$ з n = 1. Матимемо:

$$\int_{\varkappa R/2}^{r_{-}} p(r,E)dr = \int_{\varkappa R_{\rm cr}/2}^{r_{-}^{0}} p(r,-\Delta)dr.$$
 (2.85)

Інтегрування у рівнянні (2.85) можна повести точно, але вираз виглядає більш прозоро при малих $r \ (r \ll r_{-})$:

$$\int_{r}^{r_{-}} \frac{\sqrt{a - 2br + cr^{2}}}{r} dr = \sqrt{a} \left[\ln \frac{2a}{br} - f(x) - 2 \right] + O(r), \quad x = \frac{ac}{b^{2}}, \quad (2.86)$$

де функція

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}\ln(1-x) + \frac{1}{2\sqrt{x}}\ln\frac{1+\sqrt{x}}{1-\sqrt{x}} - 1, & x > 0, \\ \frac{1}{2}\ln(1-x) + \frac{\arctan\sqrt{|x|}}{\sqrt{|x|}} - 1, & x < 0. \end{cases}$$
(2.87)

Тоді рівняння (2.85) можна переписати у наступній формі:

$$\frac{R_{\rm cr}}{R} = \left[1 - \left(1 + \frac{1+2j}{4\zeta^2}\right)\frac{E+\Delta}{\Delta}\right]e^{f(x)},\tag{2.88}$$

де

$$x = \frac{\zeta^2 - j^2}{\zeta^2} \cdot \frac{E^2 - \Delta^2 - \frac{4j+5}{4\zeta^2}(E+\Delta)^2}{\left[\Delta - \left(1 + \frac{1+2j}{4\zeta^2}\right)(E+\Delta)\right]^2}.$$
 (2.89)

Для енергій, близьких до границі нижнього континууму, $E \to -\Delta$, змінна $x \to 0$, тому маємо:

$$E(\zeta,R) = -\Delta \cdot F(\zeta,R),$$
(2.90)
$$F(\zeta,R) = \left(\frac{R_{\rm cr}}{R} + \frac{1+2j}{4\zeta^2} - \frac{\zeta^2 - j^2}{3\zeta^2}\right) / \left(1 + \frac{1+2j}{4\zeta^2} - \frac{\zeta^2 - j^2}{3\zeta^2}\right).$$

Очевидно, $F(\zeta, R = R_{cr}) = 1$, де R_{cr} визначається формулою (2.84). Зокрема, для основного стану системи з j = 1/2, критична відстань R_{cr} прямує до нескінченності, якщо ширина квазічастинкової щілини $\Delta \to 0$ при $\zeta > 1/2$. Оскільки графен за відсутності зовнішніх полів є безщілинним, то система двох заряджених домішок перебуває в надкритичному режимі, як тільки їх сумарний заряд перевищує критичний $\zeta_c = 1/2$, незалежно від того, на якій відстані вони знаходяться. Звичайно, така ідеалізація викликана тим, що не враховані ефекти екранування зарядів у графені за рахунок поляризації.

2.5.3 Обчислення ширини резонансу

Ширина резонансу визначається потоком частинок на нескінченність. Запишемо рівняння неперервності:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \qquad (2.91)$$

де *ρ* = Ψ[†]Ψ – густина імовірності, **j** – вектор струму (густини потоку частинок). Для хвильової функції резонансного стану матимемо:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r}) \exp\left(-i\frac{(\varepsilon - i\frac{\Gamma}{2})t}{\hbar}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \quad \rho(\mathbf{r},t) = \Psi(\mathbf{r})^{\dagger}\Psi(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{\Gamma t}{\hbar}\right). \quad (2.92)$$

Підставимо цей вираз до рівняння (2.91) та проінтегруємо по всій площині. Отримаємо:

$$-\frac{\Gamma}{\hbar} \int d^2 \mathbf{r} \Psi(\mathbf{r})^{\dagger} \Psi(\mathbf{r}) + \oint_{\infty} \mathbf{j} d\mathbf{S} = 0.$$
 (2.93)

Перший інтеграл в силу умови нормування дорівнює одиниці, а другий – потоку частинок на нескінченності *J*, яка з точністю до фактора перед експонентою визначається імовірністю тунелювання через класично заборонену область.

Тому для ширини резонансу матимемо наступний вираз:

$$\Gamma \propto \exp\left(-2\int_{r_{-}}^{r_{+}} \frac{\sqrt{-a+2br-cr^{2}}}{r} dr\right) = \\ = \exp\left[-2\pi\left(\frac{b}{\sqrt{c}} - \sqrt{a}\right)\right], \qquad (2.94)$$

де коефіцієнти *a*, *b*, *c* означені формулами (2.81), а вирази для квазікласичних точок повороту наведені в тексті після формули (2.81).

Для енергій, близьких до границі нижнього континууму, ширина має вигляд:

$$\Gamma \propto \exp\left[-2\pi \left(\zeta \sqrt{\frac{E^2}{E^2 - \Delta^2}} - \sqrt{\zeta^2 - j^2}\right)\right] \simeq$$
$$\simeq \exp\left[-2\pi \left(\tilde{\beta} \sqrt{\frac{R}{R_{\rm cr} - R}} - \sqrt{\zeta^2 - j^2}\right)\right],$$
$$\tilde{\beta} = \sqrt{\frac{8\zeta^2 + 4j^2 + 6j + 3}{24}} \tag{2.95}$$

і прямує до нуля при $E \to -\Delta$ чи $R \to R_{\rm cr}$.

2.6 Висновки до розділу 2

У цьому 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 $\zeta_{\rm c} = 2Z_{\rm c}\alpha/\kappa = 1/2$. Таким чином, при фіксованому ζ надкритичний режим настає при певній відстані між домішками $R_{\rm cr}$, яка також називається критичною.

Оскільки змінні в рівнянні Дірака з потенціалом двох кулонівських центрів не відокремлюються в жодній відомій ортогональній системі координат, ця задача не допускає аналітичного розв'язку. Тому для знаходження залежності критичної відстані $R_{\rm cr}$ від заряду домішок ζ використовується варіаційний метод Канторовича. 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.

Залежності mR_{cr} від ζ , отримані за допомогою варіаційного методу Канторовича з різною кількістю доданків у пробній функції, зображені на Рис. 2.2 суцільною та штриховою кривими. 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" асимптотик. 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 $\zeta_c = 1/2$. 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 (криві прямують до нескінченності при $\zeta \to 1$).

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

Разом з тим, в 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 $q_{\rm TF} = 4\pi^{1/2}\alpha\sqrt{n}/\kappa$ (див. роботу [79]) і на відстанях, які перевищують відповідний просторовий масштаб $l_{\rm TF} = 1/q_{\rm TF}$, кулонівський потенціал домішок є заекранованим. У цьому випадку критична відстань для безмасових діраківських квазічастинок для зарядів $1/2 < \zeta < 1$ визначається масштабом екранування Томаса–Фермі $l_{\rm TF}$. Згідно з даними, наведеними в роботі [80], найменша

неоднорідність концентрації носіїв заряду, яка досягається експериментально, приблизно дорівнює $n \approx 10^8$ см⁻². Таким чином, бачимо, що модель з кулонівською взаємодією застосовна для відстаней між домішками, що не перевищують 100 ÷ 400 нм. Для менш чистих зразків з концентраціями $n \approx 10^{10}$ см⁻² масштаб $l_{\rm TF}$ є ще на порядок меншим. У експерименті з димерами кальцію [6] відстань між домішками $d \sim 2$ нм, тому проведений теоретичний розгляд цілком підходить для опису його результатів. Результати експерименту свідчать, що надкритична нестабільність настає в системі заряджених димерів кальцію при перевищенні їх сумарним зарядом критичного значення (з'являються резонанси в локальній густині станів). Очевидно, що в кількох спробах експерименту неможливо виставити димери на однакових відстанях. Натомість, результати показують, що перехід до надкритичного режиму не залежить від взаємного розміщення домішок, а лише від їх сумарного заряду. Ці положення цілком узгоджуються з теоретичними передбаченнями дисертаційного дослідження.

Матеріали цього розділу опубліковані в статтях [14,15].

РОЗДІЛ З НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ У СИСТЕМІ ПРОТИЛЕЖНО ЗАРЯДЖЕНИХ ДОМІШОК

3.1 Вступ

У цьому розділі розглядається задача про надкритичну нестабільність для квазічастинок у графені в потенціалі двох протилежно заряджених домішок. Цей випадок особливий тим, що в системі існує симетрія зарядового спряження, а тому спектр електрона симетричний відносно нуля. Симетрії хвильових функцій забороняють перетин енергетичних рівнів, а тому зв'язані стани не можуть перетнути квазічастинкової щілини. Тобто надкритична нестабільність у традиційній формі, коли дискретний рівень занурюється до нижнього континууму з перетворенням у резонанс, в даній задачі неможлива. Натомість, аналіз поведінки спектру і хвильових функцій при поступовому збільшенні дипольного моменту в системі дозволяє знайти новий прояв надкритичної нестабільності, що полягає у народженні з вакууму пари електрона і дірки, які одночасно перебувають у зв'язаних станах з протилежно зарядженими домішками.

Розділ побудований наступним чином. У підрозділі 3.2 сформульовано постановку задачі, окреслено теоретичну модель, в якій проводиться розгляд. У підрозділі 3.3 за допомогою техніки лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО) розраховуються енергія та хвильові функції електрона у потенціалі фізичного диполя, досліджується поведінка хвильових функцій при збільшенні відстані між домішками (дипольного моменту). Підрозділ 3.4 присвячений аналогічним розрахункам за допомогою варіаційного методу Гальоркіна-Канторовича (ГК). У підрозділі 3.5 проводиться узагальнення попередньо отриманих результатів на випадок, коли заряди домішок різняться не тільки за знаком, а ще й за абсолютним значенням. Наостанок, в підрозділі 3.6 наведені висновки до розділу.

3.2 Постановка задачі

3.2.1 Рівняння Дірака

Електронні квазічастинкові стани поблизу діраківських точок у графені в зовнішньому електромагнітному полі двох протилежно заряджених кулонівських домішок описуються (2 + 1)-вимірним гамільтоніаном Дірака:

$$\hat{H} = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\boldsymbol{p}} + \xi \Delta \sigma_z + V(r), \qquad (3.1)$$

де $\hat{p} = -i\hbar \nabla$ – оператор імпульсу, σ_i – матриці Паулі, Δ – напівширина квазічастинкової щілини. Щілину в зонному спектрі графену можна відкрити різними способами, наприклад, використанням специфічних підкладок (нітрид бору) [32–34], або просто за рахунок квантоворозмірних ефектів при використанні графенових нанострічок [28]. Гамільтоніан (3.1) діє на двокомпонентні спінори $\Psi_{\xi,s}$, що несуть долинний $(\xi = \pm)$ та спіновий $(s = \pm)$ індекси. Будемо користуватися стандартною домовленістю, згідно з якою $\Psi_{+,s}^T = (\psi_A, \psi_B)_{K+s}$, а $\Psi_{-,s}^T = (\psi_B, \psi_A)_{K-s}$. Тут A, B відповідають за дві підґратки гексагональної ґратки графену.

Ідеалізований потенціал Кулона є сингулярним, коли відстань між взаємодіючими частинками прямує до нуля. На математичному рівні це призводить до явища "падіння на центр", коли система при перевищенні зарядом деякого порогового значення не має визначеного основного стану. Щоб уникнути таких небажаних наслідків, потенціал треба регуляризувати [41]. Більше того, зовнішній заряд повинен бути "розмазаним" по скінченній ділянці графенової плівки, інакше рівняння Дірака (континуальне наближення) стає незастосовним, і інші, сусідні σ -орбіталі мають бути включені до розгляду [47]. Для графену існує дуже простий і природний спосіб регуляризації, який легко реалізується на експерименті. Домішкові заряди можна розмістити у підкладці, на деякій невеликій відстані r_0 від графенового листа. Регуляризований таким чином потенціал електричного диполя, утвореного зарядами $\pm Ze$, що розміщені в точках ($\pm R/2$, 0) площини xOy, має вигляд:

$$V(\mathbf{r}) = \frac{Ze^2}{\kappa} \left(\frac{1}{\sqrt{(x-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x+R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} \right), \quad (3.2)$$

де κ – діелектрична проникність підкладки. Параметр регуляризації r_0 у кілька разів перевищує період ґратки графену.

Оскільки потенціал взаємодії від спіну не залежить, то надалі спінові індекси *s* опускатимемо. В подальшому для визначеності вважатимемо, що електрон знаходиться в долині поблизу діраківської точки K_+ (рівняння Дірака для електрона в долині поблизу K_- отримується шляхом заміни Δ на $-\Delta$).

Основна проблема, що виникає при розв'язуванні рівняння Дірака для електрона в потенціалі електричного диполя, – це те, що змінні не розділяються в жодній відомій ортогональній системі координат. Тому застосуємо наближені методи: техніку лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО) та варіаційний метод Гальоркіна-Канторовича (ГК).

Зручно працювати з безрозмірними величинами $\hat{h} = \frac{\hat{H}}{\Delta}$ і $\varepsilon = \frac{E}{\Delta}$. Також, в подальшому вважатимемо, що всі координати і відстані є безрозмірними і виражаються в одиницях $R_{\Delta} = \frac{\hbar v_F}{\Delta}$. Означимо ще безрозмірну

константу взаємодії $\zeta = \frac{Ze^2}{\hbar v_F \kappa}$. Тоді рівняння Дірака для двокомпонентного спінора $\psi(\mathbf{r}) = (\phi, \chi)^T$ набуде наступного вигляду:

$$\begin{cases} -i(\partial_x + i\partial_y)\phi + (v - \varepsilon - 1)\chi = 0, \\ -i(\partial_x - i\partial_y)\chi + (v - \varepsilon + 1)\phi = 0. \end{cases}$$
(3.3)

Гамільтоніан Дірака в потенціалі диполя має таку дискретну симетрію:

$$\hat{U} = \sigma_z \hat{K} \mathcal{R}_y, \tag{3.4}$$

де \hat{K} – оператор комплексного спряження, \mathcal{R}_y – оператор відбиття $y \to -y$. Неважко впевнитися, що комутатор $[\hat{H}, \hat{U}] = 0$. Оскільки $\hat{U}^2 = 1$, хвильові функції розділяються на два класи $\hat{U}|\Psi_{\lambda}\rangle = \lambda |\Psi_{\lambda}\rangle$, де $\lambda = \pm 1$. Тоді компоненти хвильової функції $|\Psi_+\rangle$ мають задовольняти наступним умовам:

$$\begin{cases} \phi^*(-y) = \phi(y), \\ \chi^*(-y) = -\chi(y). \end{cases}$$
(3.5)

У наступних підрозділах будуть знайдені наближені розв'язки системи рівнянь (3.3) за допомогою методів ЛКАО та Гальоркіна-Канторовича. Та перед цим доцільно розглянути спрощену, але точно розв'язувану задачу з прямокутним "дипольним" потенціалом в (1+1)-вимірному просторічасі. Це дасть змогу виявити основні закономірності в електронному спектрі, прослідкувати за поведінкою хвильових функцій. Природно очікувати, що аналогічні особливості будуть виявлятися і в основній (2+1)вимірній задачі з електричним диполем.



Рис. 3.1. Прямокутний "дипольний" потенціал спрощеної одновимірної моделі.

3.2.2 Спрощена одновимірна модель

Розглянемо надкритичну нестабільність у спрощеній одновимірній моделі. Обезрозмірений гамільтоніан задачі має наступний вигляд:

$$\hat{h} = -i\sigma_x\partial_x + \sigma_z + v(x). \tag{3.6}$$

Потенціал оберемо у вигляді прямокутних ями і бар'єра, що утворюють свого роду "диполь" (див. Рис. 3.1):

$$v(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < -a - d; \\ -v_0, & \text{якщо } -a - d \le x < -a + d; \\ 0, & \text{якщо } -a + d \le x < a - d; \\ v_0, & \text{якщо } a - d \le x < a + d; \\ 0, & \text{якщо } x \ge a + d. \end{cases}$$
(3.7)

Рівняння Дірака для двокомпонентного спінора $|\Psi\rangle = (\phi, \chi)^T$ набуде вигляду:

$$\begin{cases} -i\partial_x \phi + (v - \varepsilon - 1)\chi = 0, \\ -i\partial_x \chi + (v - \varepsilon + 1)\phi = 0. \end{cases}$$
(3.8)

Виключаючи нижню компоненту $\chi = i\partial_x \phi/(v - \varepsilon - 1)$, отримаємо диференціальне рівняння другого порядку на верхню компоненту:

$$\phi'' - \frac{v'}{v - \varepsilon - 1} \phi' + \left((v - \varepsilon)^2 - 1 \right) \phi = 0.$$
 (3.9)

Оскільки похідна від потенціалу (3.7) має вигляд

$$v'(x) = v_0 \left(-\delta(x+a+d) + \delta(x+a-d) + \delta(x-a+d) - \delta(x-a-d)\right),$$
(3.10)

то другий доданок у рівнянні (3.9) дорівнює нулю скрізь, окрім чотирьох точок, де потенціал змінюється стрибком. Розв'яжемо рівняння (3.9) в кожній із п'яти областей, де потенціал є сталим, і "зшиємо" розв'язки в точках розриву потенціалу, використовуючи умови неперервності кожної з двох компонент спінора.

Отримаємо наступні розв'язки:

1) x < -a - d

$$\phi_I(x) = C_1 e^{\kappa_0 x},$$

$$\chi_I(x) = -iC_1 \frac{\kappa_0}{\varepsilon + 1} e^{\kappa_0 x};$$
(3.11)

2) -a - d < x < -a + d

$$\phi_{II}(x) = C_2 \sin(k_1 x) + C_3 \cos(k_1 x),$$

$$\chi_{II}(x) = -i \frac{k_1}{v_0 + \varepsilon + 1} \left(C_2 \cos(k_1 x) - C_3 \sin(k_1 x) \right); \quad (3.12)$$

3)
$$-a + d < x < a - d$$

 $\phi_{III}(x) = C_4 e^{\kappa_0 x} + C_5 e^{-\kappa_0 x},$

$$\chi_{III}(x) = -i \frac{\kappa_0}{\varepsilon + 1} \left(C_4 e^{\kappa_0 x} - C_5 e^{-\kappa_0 x} \right); \qquad (3.13)$$

$$4) \ a - d < x < a + d$$

$$\phi_{IV}(x) = C_6 \sin(k_2 x) + C_7 \cos(k_2 x),$$

$$\chi_{IV}(x) = i \frac{k_2}{v_0 - \varepsilon - 1} \left(C_6 \cos(k_2 x) - C_7 \sin(k_2 x) \right); \quad (3.14)$$

5) x > a + d

$$\phi_V(x) = C_8 e^{-\kappa_0 x},$$

$$\chi_V(x) = i C_8 \frac{\kappa_0}{\varepsilon + 1} e^{-\kappa_0 x}.$$
(3.15)

Тут введено позначення $\kappa_0 = \sqrt{1-\varepsilon^2}, \ k_1 = \sqrt{(v_0+\varepsilon)^2-1}$ та $k_2 = \sqrt{(v_0-\varepsilon)^2-1}$. Застосовуючи умови зшивки

$$\phi(x_i+0) = \phi(x_i-0), \quad \chi(x_i+0) = \chi(x_i-0), \quad i = \overline{1, 4}$$
(3.16)

в точках

$$x_1 = -(a+d), \quad x_2 = -(a-d), \quad x_3 = a-d, \quad x_4 = a+d, \quad (3.17)$$

отримаємо наступну систему лінійних алгебраїчних рівнянь на коефіцієнти C_k :

$$\hat{A}\vec{C} = \vec{0},\tag{3.18}$$

де

$$\begin{aligned} A_{11} &= -A_{78} = e^{-(a+d)\kappa_0}, \quad A_{12} = \sin\left[(a+d)k_1\right], \\ A_{13} &= -\cos\left[(a+d)k_1\right], \quad A_{21} = A_{88} = \frac{\kappa_0 e^{-(a+d)\kappa_0}}{1+\varepsilon}, \\ A_{22} &= -\frac{k_1 \cos\left[(a+d)k_1\right]}{1+\varepsilon+v_0}, \quad A_{23} = -\frac{k_1 \sin\left[(a+d)k_1\right]}{1+\varepsilon+v_0}, \\ A_{32} &= -\sin\left[(a-d)k_1\right], \quad A_{33} = \cos\left[(a-d)k_1\right], \\ A_{55} &= -A_{34} = e^{-(a-d)\kappa_0}, \quad A_{54} = -A_{35} = e^{(a-d)\kappa_0}, \\ A_{56} &= -\sin\left[(a-d)k_2\right], \quad A_{57} = -\cos\left[(a-d)k_2\right], \quad (3.19) \\ A_{42} &= \frac{k_1 \cos\left[(a-d)k_1\right]}{1+\varepsilon+v_0}, \quad A_{43} = \frac{k_1 \sin\left[(a+d)k_1\right]}{1+\varepsilon+v_0}, \\ A_{44} &= A_{65} = -\frac{\kappa_0 e^{-(a-d)\kappa_0}}{1+\varepsilon}, \quad A_{45} = A_{64} = \frac{\kappa_0 e^{(a-d)\kappa_0}}{1+\varepsilon}, \\ A_{66} &= -\frac{k_2 \cos\left[(a-d)k_2\right]}{1+\varepsilon-v_0}, \quad A_{67} &= \frac{k_2 \sin\left[(a-d)k_2\right]}{1+\varepsilon-v_0}, \\ A_{76} &= \sin\left[(a+d)k_2\right], \quad A_{77} &= \cos\left[(a+d)k_2\right], \\ A_{86} &= \frac{k_2 \cos\left[(a+d)k_2\right]}{1+\varepsilon-v_0}, \quad A_{87} &= -\frac{k_2 \sin\left[(a+d)k_2\right]}{1+\varepsilon-v_0}, \end{aligned}$$

а всі інші коефіцієнти рівні нулю. Секулярне рівняння

$$\det \hat{A} = \frac{2e^{-4a\kappa_0}}{(1+\varepsilon)^2 (1-v_0+\varepsilon) (1+v_0+\varepsilon)} \times \\ \times \left\{ \left[-v_0^2 + e^{4(a-d)\kappa_0} \left(-1 - \varepsilon^4 - k_1k_2 + \varepsilon^2 \left(2 + v_0^2 + k_1k_2 \right) \right) \right] \cos\left(2d\left(k_2 - k_1\right)\right) + \right. \\ \left. + \left[v_0^2 + e^{4(a-d)\kappa_0} \left(1 + \varepsilon^4 - k_1k_2 + \varepsilon^2 \left(-2 - v_0^2 + k_1k_2 \right) \right) \right] \cos\left(2d\left(k_2 + k_1\right)\right) + \right. \\ \left. + \left. e^{4(a-d)\kappa_0}\kappa_0 \left[\left(\left(1 - \varepsilon^2 \right) \left(k_2 - k_1 \right) - v_0\varepsilon \left(k_1 + k_2 \right) \right) \sin\left(2d\left(k_2 - k_1 \right) \right) + \right. \\ \left. + \left. \left(v_0\varepsilon \left(k_2 - k_1 \right) + \left(-1 + \varepsilon^2 \right) \left(k_1 + k_2 \right) \right) \sin\left(2d\left(k_2 + k_1 \right) \right) \right] \right\} = 0 \right]$$
(3.20)

визначає спектр задачі. Всі формули наведені для випадку a > d. Результати для a < d отримуються шляхом заміни $a \leftrightarrow d$.

Поведінка хвильових функцій суттєво залежить від спектру однієї ями, тому розв'язок відповідної задачі наведений в Додатку А. Нехай при заданих v_0 , d електрон в задачі з однією прямокутною ямою має



Рис. 3.2. Залежність енергії електрона від відстані між ямою і бар'єром для d = 0.25 і різних значень глибини ями: $v_0 = 3$ (червона штрихова крива) та $v_0 = 6$ (синя суцільна крива).

від'ємну енергію. Розглянемо в задачі з "диполем" два граничні випадки.

а) Коли яма і бар'єр знаходяться на малій відстані і частково перекриваються (a < d), то їхня ширина ефективно зменшується, а тому енергія стану, локалізованого на ямі, повинна мати додатне значення ($\varepsilon \to +1$ при $a \to 0$).

б) При а → ∞ яму і бар'єр можна вважати незалежними, тому енергетичні рівні "диполя" розділяються на дві групи: рівні ями і рівні бар'єра. Тоді стан, локалізований на ямі, повинен мати від'ємну енергію.

У силу зарядової симетрії задачі рівні енергії розміщуються симетрично відносно нуля. Тому при проходженні через нуль вони обов'язково мають попарно перетинатися. Оскільки такий перетин заборонений теоремою Вігнера-фон Неймана, криві енергії не проходять значення $\varepsilon = 0$. Звідси слідує, що при зміні відстані між ямою і бар'єром від нуля до нескінченності хвильова функція стану, що відповідає енергії певного знаку, зазнає зміни локалізації (з ями на бар'єр чи навпаки). Якщо ж енергія електрона в задачі з однією ямою є додатною, то зміни локалізації немає.


Рис. 3.3. Квадрати модулів хвильових функцій зв'язаного стану з від'ємною енергією для $v_0 = 3$, d = 0.25 та різних відстаней між ямою і бар'єром: (a) $2a_1 = 0.15$, (б) $2a_2 = 1.5$. Зеленим показано положення ями і бар'єра.



Рис. 3.4. Квадрати модулів хвильових функцій зв'язаного стану з від'ємною енергією для $v_0 = 6$, d = 0.25 та різних відстаней між ямою і бар'єром: (a) $2a_1 = 0.14$, (б) $2a_2 = 0.35$, (в) $2a_3 = 0.7$, (г) $2a_4 = 1.6$.

Коли в початковий момент яма і бар'єр практично суміщені і ми починаємо їх розсувати, з континуумів виходять по одному енергетичному рівню. Рівень з додатною енергією, як зазначалося вище, локалізується на ямі, а рівень з від'ємною енергією – на бар'єрі. Рівень, що вийшов з нижнього континууму (моря Дірака) є заповненим електроном. У процесі зміни локалізації цей електрон мігрує на яму, а на його місці біля бар'єра утворюється дірка. Тому маємо народжену з вакууму пару електрона і дірки, які перебувають у зв'язаному стані з ямою і бар'єром, відповідно.

Наведемо для прикладу результати чисельного аналізу даної задачі. В обчисленнях використовується значення півширини ями d = 0.25 і різні значення її глибини. Зображені квадрати модулів хвильових функцій, що відповідають станам з від'ємною енергією. Залежності енергії від відстані між ямою і бар'єром наведені на Рис. 3.2: для $v_0 = 3$ – штрихова червона крива та для $v_0 = 6$ – суцільна синя крива. Відповідні квадрати модулів хвильових функцій наведені на Рис. 3.3–3.4.

Для більших значень глибини ями v_0 , коли кілька енергетичних рівнів задачі з однією ямою перетинають нульове значення $\varepsilon = 0$ (див. Рис. А.1), спостерігаються осциляції у поведінці енергетичних рівнів, а також хвильові функції змінюють свою локалізацію по кілька разів з ями на бар'єр і навпаки.

На Рис. 3.5 зображено залежність енергії зв'язаних станів у одновимірному прямокутному дипольному потенціалі від відстані між ямою і бар'єром для d = 0.25 і двох значень сили потенціалу: $v_0 = 9$ (зелені штрихові криві) та $v_0 = 12$ (сині суцільні криві). Відповідно до Рис. А.1 з Додатку А, при $v_0 = 9$ тільки один енергетичний рівень в задачі з 1 ямою перетнув нульове значення $\varepsilon = 0$. Це відповідає тому, що на зелених штрихових кривих на Рис. 3.5 присутня лише одна точка від-



Рис. 3.5. Енергія зв'язаних станів як функція відстані між ямою та бар'єром для d = 0.25 і двох значень глибини ями: $v_0 = 9$ (зелені штрихові криві) та $v_0 = 12$ (сині суцільні криві).

штовхування рівнів (точка, до якої рівні наближалися один до одного, а після неї почали відштовхуватися). При $v_0 = 12$ вже два рівні в задачі з 1 ямою перетнули нульове значення $\varepsilon = 0$ (див Рис. А.1). Цьому відповідає наявність уже двох точок відштовхування рівнів на синіх суцільних кривих на Рис. 3.5, між якими є точка максимального розходження рівнів.

Для демонстрації того, як осциляції енергетичних рівнів при $v_0 = 12$ відображаються в локалізаційних властивостях хвильової функції зв'язаного стану з від'ємною енергією, на Рис. 3.6 зображені квадрати модулів хвильових функцій для семи значень відстані між ямою і бар'єром *a*, які відмічені червоними точками на Рис. 3.5. З Рис. 3.6 (б) видно, що в точці відштовхування енергетичних рівнів хвильова функція електрона локалізована як на ямі, так і на бар'єрі. При поступовому збільшенні відстані між ямою і бар'єром локалізація зміщується в сторону ями [Рис. 3.6 (в)], а в точці максимального розходження рівнів рівновага відновлюється знову [Рис. 3.6 (г)]. Далі локалізація зміщується в сторону бар'єра [Рис. 3.6 (д)], а в другій точці відштовхування рівнів хвильова функція знову однаковою мірою локалізована як на ямі, так і на бар'єрі [Рис. 3.6 (е)]. При подальшому збільшенні відстані між ямою і бар'єром



Рис. 3.6. Квадрати модулів хвильових функцій станів з від'ємною енергією для $v_0 = 12, d = 0.25$ і семи різних значень відстані між центрами ями і бар'єра: (a) 2a = 0.08, (б) 2a = 0.144, (в) 2a = 0.19, (г) 2a = 0.25, (д) 2a = 0.34, (е) 2a = 0.42, (є) 2a = 1.0. Відповідні значення *a* позначені червоними точками на Рис. 3.5. Зеленим схематично позначено потенціали ями і бар'єра.

осциляції енергетичних рівнів припиняються, перестає змінюватися і локалізація хвильової функції. При $v_0 = 12$ вона остаточно локалізується на ямі [Рис. 3.6 (є)].

3.3 Техніка ЛКАО

У попередньому підрозділі було з'ясовано, що надкритична нестабільність в одновимірній задачі з ямою і бар'єром пов'язана зі зміною локалізації хвильової функції. Тепер повернемося до розгляду задачі з двома протилежно зарядженими домішками у графені. В цьому розділі застосуємо метод лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО).

Техніка ЛКАО є добре відомою і широко використовується в молекулярній фізиці [81]. Хвильові функції в цьому методі обирають у вигляді лінійних комбінацій базисних функцій, які, як правило, є одноелектронними функціями, локалізованими на відповідних атомах у молекулі. Коефіцієнти лінійної комбінації визначають шляхом мінімізації повної енергії системи. Метод ЛКАО нещодавно використовувався в роботі [10] до розв'язання симетричної задачі про два кулонівські центри у графені, і його результати є досить близькими до тих, що отримані шляхом зшивання асимптотик [14, 15].

3.3.1 Вибір атомних орбіталей

У ролі атомних орбіталей у задачі (3.3) оберемо хвильові функції основного стану електрона в полі позитивно зарядженої домішки та основного стану дірки в полі негативно зарядженої домішки (ці хвильові функції пов'язані одна з одною операцією зарядового спряження).

Означимо гамільтоніани електрона у регуляризованому потенціалі однієї домішки певного заряду наступним чином:

$$\hat{h}_{\pm} = -i(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z \pm \frac{\zeta}{\sqrt{r^2 + r_0^2}}.$$
(3.21)

Тоді рівняння Дірака для електрона у графені з однією позитивно зарядженою домішкою має вигляд:

$$\hat{h}_{-}\Psi = \varepsilon_0 \Psi. \tag{3.22}$$

Спінорну хвильову функцію в полярних координатах (r, θ) запишемо так

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{i(j-1/2)\theta} f(r) \\ -i \ e^{i(j+1/2)\theta} g(r) \end{pmatrix}, \qquad (3.23)$$

де *j* – квантове число повного кутового моменту. Рівняння Дірака запишемо у вигляді системи диференціальних рівнянь на радіальні функції:

$$\begin{cases} f' - \frac{j - 1/2}{r} f = (1 + \varepsilon - v(r))g, \\ g' + \frac{j + 1/2}{r} g = (1 - \varepsilon + v(r))f. \end{cases}$$
(3.24)

Для основного стану електрона j = 1/2, тому одну з атомних орбіталей $|\Psi_{-}\rangle$ шукатимемо у вигляді:

$$\Psi_{-} = \begin{pmatrix} f(r) \\ -i \ e^{i\theta}g(r) \end{pmatrix}.$$
 (3.25)

Для регуляризованого потенціалу v(r) не вдається отримати розв'язок рівняння Дірака (3.24) в аналітичному вигляді, тому шукатимемо радіальні функції шляхом чисельного інтегрування. Щоб знайти граничні умови при r = 0, дослідимо асимптотичну поведінку розв'язку в околі початку координат. Для цього виразимо функцію g(r) через f(r) і отримаємо на останню диференціальне рівняння другого порядку:

$$f'' + \frac{f'}{r} + \frac{\zeta^2}{r_0^2} f = 0, \qquad (3.26)$$

регулярний розв'язок якого має вигляд:

$$f = J_0 \left(\frac{\zeta r}{r_0}\right). \tag{3.27}$$

Таким чином, для чисельного інтегрування рівняння (3.24) слід обрати граничні умови при r = 0 у вигляді f(0) = 1 і g(0) = 0. Спектр визначаємо за допомогою "шутінг"-методу (описаний у підрозділі 2.4), вимагаючи експоненційного загасання хвильових функцій на нескінченності:

$$f(r), g(r) \sim \exp\left(-\sqrt{1-\varepsilon_0^2} r\right), \ r \to \infty.$$
 (3.28)

Знайдені хвильові функції нормуємо наступним чином:

$$\int d^2x \Psi^{\dagger} \Psi = 2\pi \int_{0}^{\infty} (|f(r)|^2 + |g(r)|^2) r dr = 1.$$
 (3.29)

Залежність енергії основного стану електрона в регуляризованому потенціалі домішки від її заряду наведена на Рис. 3.7 для різних значень регуляризуючого параметра.

Неважко бачити, що унітарний оператор $\hat{U}_c = \sigma_x \hat{K}$, де \hat{K} – оператор комплексного спряження, переводить гамільтоніани \hat{h}_+ та \hat{h}_- один в одного:

$$\hat{U}_c \hat{h}_- \hat{U}_c^{\dagger} = -\hat{h}_+. \tag{3.30}$$

Тому хвильова функція $\Psi_{+} = -i\hat{U}_{c}\Psi_{-}$ є власною для гамільтоніана h_{+} з власним значенням $-\varepsilon_{0}$. Явний вигляд цієї функції такий:

$$\Psi_{+} = \begin{pmatrix} e^{-i\theta}g(r) \\ -if(r) \end{pmatrix}, \qquad (3.31)$$

де радіальні функції f і g такі ж, як і в (3.25).



Рис. 3.7. Спектр електрона в регуляризованому кулонівському потенціалі для різних значень регуляризуючого параметра: $r_0 = 0.05R_{\Delta}$ – червона суцільна крива, $r_0 = 0.01R_{\Delta}$ – синя штрихова крива, $r_0 = 0$ (сингулярний потенціал) – зелена штрих-пунктирна крива.

3.3.2 Пошук спектру та хвильових функцій

Тепер перейдемо до розгляду рівняння Дірака для квазічастинок у графені в потенціалі електричного диполя. Відповідний гамільтоніан має вигляд:

$$\hat{h} = -i(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \sigma_z + \zeta \left(-\frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} + \frac{1}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} \right).$$
(3.32)

Відповідно до методу ЛКАО, хвильові функції шукатимемо у вигляді наступної лінійної комбінації:

$$|\Psi\rangle = v_1|1\rangle + v_2|2\rangle, \qquad (3.33)$$

де $|1\rangle = |\Psi_{-}(r_{1},\theta_{1})\rangle, |2\rangle = |\Psi_{+}(r_{2},\theta_{2})\rangle.$ Тут $r_{1,2} = \sqrt{(x \pm R/2)^{2} + y^{2}},$ $e^{i\theta_{1,2}} = (x \pm R/2 + iy)/r_{1,2},$ а орбіталі $|\Psi_{\pm}\rangle$ означені в (3.25), (3.31).

Стаціонарне рівняння Дірака має вигляд:

$$\hat{h}|\Psi\rangle = \varepsilon|\Psi\rangle. \tag{3.34}$$

Спроектуємо це рівняння по черзі на стани $|1\rangle$ і $|2\rangle$:

$$v_1 h_{11} + v_2 h_{12} = \varepsilon (v_1 + v_2 S),$$
 (3.35a)

$$v_1 h_{21} + v_2 h_{22} = \varepsilon (v_1 S + v_2), \qquad (3.356)$$

тоді з умови нетривіальності коефіцієнтів $v_{1,2}$ матимемо секулярне рівняння:

$$\det \begin{vmatrix} h_{11} - \varepsilon & h_{12} - S\varepsilon \\ h_{21} - S\varepsilon & h_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \qquad (3.36)$$

де $h_{ij} = \langle i | \hat{h} | j \rangle, \, i, j = \overline{1, 2}, \, S = \langle 1 | 2 \rangle.$

Обчислимо інтеграл перекриття:

$$S = \langle 1|2 \rangle = \int d^2 x \left(f(r_1)g(r_2)e^{-i\theta_2} + f(r_2)g(r_1)e^{-i\theta_1} \right) = = \int d^2 x \left(f(r_1)g(r_2)\frac{x-R/2}{r_1} + f(r_2)g(r_1)\frac{x+R/2}{r_2} \right) = = |B 2-My доданку \quad x \to -x| = 0.$$
(3.37)

Зручно виразити гамільтоніан (3.32) через означені вище гамільтоніани (3.21), тому що атомні орбіталі $|\Psi_{\pm}\rangle$ є їх власними функціями.

$$\hat{h} = \hat{h}_{-}(1) + \frac{\zeta}{\sqrt{r_{2}^{2} + r_{0}^{2}}} = \hat{h}_{+}(2) - \frac{\zeta}{\sqrt{r_{1}^{2} + r_{0}^{2}}}.$$
(3.38)

Тепер обчислимо матричні елементи:

$$h_{11} = \varepsilon_0 + \langle 1 | \frac{\zeta}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} | 1 \rangle = \varepsilon_0 + \zeta C, \qquad (3.39a)$$

$$h_{22} = -\varepsilon_0 - \langle 2 | \frac{\zeta}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} | 2 \rangle = -\varepsilon_0 - \zeta C = -h_{11}, \qquad (3.396)$$

$$h_{12} = -\varepsilon_0 S - \langle 1 | \frac{\zeta}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} | 2 \rangle = -\zeta A,$$
 (3.40a)

$$h_{21} = \varepsilon_0 S + \langle 2 | \frac{\zeta}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} | 1 \rangle = -\zeta A = h_{12},$$
 (3.406)

де ε_0 – енергія основного стану електрона в полі одного кулонівського центра.

Кулонівський інтеграл С має вигляд:

$$C = \langle 1 | \frac{1}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} | 1 \rangle = \int d^2 x \left(f^2(r_1) + g^2(r_1) \right) \frac{1}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} = = \left| r_2 = \sqrt{r_1^2 - 2r_1 R \cos \theta_1 + R^2} \right| = = 2 \int_0^\infty r_1 dr_1 \left(f^2(r_1) + g^2(r_1) \right) \int_0^\pi d\theta_1 \frac{1}{\sqrt{r_1^2 - 2r_1 R \cos \theta_1 + R^2 + r_0^2}} = = \int_0^\infty \frac{4r dr}{\sqrt{(r+R)^2 + r_0^2}} \operatorname{K} \left(\sqrt{\frac{4rR}{(r+R)^2 + r_0^2}} \right) \left(f^2(r) + g^2(r) \right), \quad (3.41)$$

де K(k) - повний еліптичний інтеграл першого роду (див. Додаток Б.1). Обмінний інтеграл A дорівнює

$$A = \langle 1 | \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} | 2 \rangle =$$

= $\int d^2 x \left(f(r_1) g(r_2) e^{-i\theta_2} + f(r_2) g(r_1) e^{-i\theta_1} \right) \frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} =$
= $2 \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{0}^{\infty} dy f(r_1) g(r_2) \frac{x - R/2}{r_1} \left(\frac{1}{\sqrt{r_1^2 + r_0^2}} - \frac{1}{\sqrt{r_2^2 + r_0^2}} \right).$ (3.42)

Кулонівський та обмінний інтеграли знаходимо чисельно, якщо відомі радіальні функції *f* і *g*.

Остаточно, матимемо спектр:

$$\varepsilon = \pm \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2} = \pm \sqrt{(\varepsilon_0 + \zeta C)^2 + \zeta^2 A^2},$$
 (3.43)

який є явно симетричним відносно заміни $\varepsilon \to -\varepsilon$ завдяки зарядовій симетрії задачі.

Коефіцієнти лінійної комбінації (3.33) для від'ємної гілки у спектрі мають вигляд:

$$v_1 = \frac{h_{12}}{\sqrt{(h_{12})^2 + (h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2})^2}},$$
 (3.44a)

$$v_2 = -\frac{h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2}}{\sqrt{(h_{12})^2 + (h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2})^2}}.$$
 (3.446)

3.3.3 Аналіз результатів

Дослідимо асимптотичну поведінку кулонівського та обмінного інтегралів при прямуванні відстані між домішками до нескінченності. Оскільки повний еліптичний інтеграл має асимптотику $K(x) = \frac{\pi}{2} + \mathcal{O}(x^2)$ при $x \to 0$, кулонівський інтеграл дорівнює:

$$C \simeq \frac{1}{R} 2\pi \int_{0}^{\infty} dr \, r \, \left(f^2(r) + g^2(r) \right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{R^3}\right) = \frac{1}{R} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{R^3}\right), \quad (3.45)$$

де в останній рівності враховано умову нормування (3.29) для хвильових функцій.

Внесок в обмінний інтеграл дають області перекриття хвильових функцій. Враховуючи, що останні експоненційно загасають на нескінченності (3.28), можна оцінити асимптотику обмінного інтеграла як

$$A \sim \exp\left(-\sqrt{1-\varepsilon_0^2}R\right), \quad R \to \infty.$$
 (3.46)

З виразів (3.45), (3.46) бачимо, що кулонівський та обмінний інтеграли прямують до нуля при $R \to \infty$, тому енергія системи при великих відстанях між домішками, як і очікувалося, прямує до значень енергії в полі кожної з двох відокремлених домішок, тобто $\varepsilon \to \pm |\varepsilon_0|$.

З формули (3.43) і з того факту, що $C \ge 0$, можна зробити висновок, що відштовхування рівнів енергії може спостерігатися лише тоді, коли $\varepsilon_0 < 0$. В цьому випадку рівні енергії максимально зближуються поблизу точки, де $\zeta C(R) = |\varepsilon_0|$. В цій же точці коефіцієнти лінійної комбінації $|v_1| = |v_2| = 1/\sqrt{2}$, тобто з однаковою імовірністю електрон локалізується на обох домішках. Різниця квадратів модулів коефіцієнтів v_1 і v_2 має вигляд:

$$|v_2|^2 - |v_1|^2 = \frac{2h_{11}\left(h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2}\right)}{(h_{12})^2 + (h_{11} + \sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2})^2} \sim \operatorname{sign}(h_{11}). \quad (3.47)$$

З формул (3.45), (3.46), бачимо, що при $R \to \infty$ відношення $\lambda \equiv \frac{h_{12}}{|h_{11}|}$ є експоненційно малим параметром. Тоді для від'ємної гілки спектру $\varepsilon = -\sqrt{(h_{11})^2 + (h_{12})^2} \approx -|h_{11}| \left(1 + \frac{1}{2}\lambda^2\right)$. Розглянемо окремо два випадки:

а) $\varepsilon_0 > 0$. Тоді і $h_{11} > 0$, $h_{11} - \varepsilon \approx 2h_{11} \left(1 + \frac{1}{4}\lambda^2\right)$. Для коефіцієнтів матимемо вирази:

$$v_1 = \frac{\lambda}{2} + \mathcal{O}(\lambda^3) \to 0,$$

$$v_2 = -\left(1 - \frac{1}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^4)\right), |v_2| \to 1,$$
(3.48)

тобто коефіцієнти експоненційно прямують до своїх граничних значень. Бачимо, що в цьому випадку зміни локалізації електрона немає, він залишається локалізованим на від'ємно зарядженій домішці.

б) $\varepsilon_0 < 0$. Тоді існує така відстань між домішками R, при пере-

вищенні якої і $h_{11} < 0, h_{11} - \varepsilon \approx \frac{1}{2} |h_{11}| \lambda^2$. Для коефіцієнтів матимемо вирази:

$$v_1 = \operatorname{sign}(h_{12}) \left(1 - \frac{1}{8}\lambda^2 + \mathcal{O}(\lambda^4) \right), \quad |v_1| \to 1,$$

$$v_2 = -\frac{|\lambda|}{2} + \mathcal{O}(\lambda^3) \to 0, \quad (3.49)$$

тобто коефіцієнти експоненційно прямують до своїх граничних значень. Бачимо, що в цьому випадку спостерігається зміна локалізації електрона, бо він при $R \to \infty$ локалізований на додатно зарядженій домішці.

Недоліком методу ЛКАО є те, що асимптотична поведінка хвильових функцій на нескінченності ~ $e^{-\sqrt{1-\varepsilon_0^2}r}$, а не ~ $e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}r}$, як мало б бути. Особливо гостро цей недолік постає при малих відстанях R між домішками, коли справжня енергія системи прямує до границь континуумів, а тому експоненційні загасання мають бути слабкими. Але в цьому методі хвильові функції будуються з хвильових функцій задачі з одним центром, а тому характер загасання у них за будь-яких відстаней є однаковим і визначається лише енергією основного стану електрона в полі одного центра. Отже, при малих R даний метод є незастосовним.

На Рис. 3.8 наведено спектр, отриманий методом ЛКАО для двох різних значень заряду домішок: $\zeta = 0.65 \ (\varepsilon_0 > 0)$ – червоні штрихові криві та $\zeta = 0.85 \ (\varepsilon_0 < 0)$ – сині суцільні криві. Значення регуляризуючого параметра скрізь обране $r_0 = 0.05 R_{\Delta}$.

На Рис. 3.9 зображено залежності енергії електрона від заряду домішок при фіксованому значенні відстані між ними. Бачимо, що ці залежності також мають характерні екстремуми, при переході через які змінюється локалізація хвильових функцій. На Рис. 3.10 наведено графік залежності коефіцієнтів лінійної комбінації (3.33) від відстані між домішками при $\zeta = 0.85$. Видно, що в точці $R = R_m \approx 1.95$ відбуває-



Рис. 3.8. Залежність енергії системи від відстані між домішками для двох різних значень заряду домішок: $\zeta = 0.65 \ (\varepsilon_0 > 0)$ – червоні штрихові криві та $\zeta = 0.85 \ (\varepsilon_0 < 0)$ – сині суцільні криві.



Рис. 3.9. Залежність енергії системи від заряду домішок для різних значень відстані між домішками: R = 2 – зелені суцільні криві, R = 3 – червоні штрихові криві, R = 5 – сині штрих-пунктирні криві.



Рис. 3.10. Залежність модулів коефіцієнтів лінійної комбінації від відстані між домішками при $\zeta = 0.85$: $|v_1(R)|$ – синя крива, $|v_2(R)|$ – зелена крива. Штриховою лінією позначено точку зміни локалізації $R_m \approx 1.95$.



Рис. 3.11. Квадрат модуля хвильової функції для $\zeta = 0.85$ і різних відстаней між домішками: $R_1 = 1.25, R_2 = 2.0$ та $R_3 = 2.25$.

ться зміна локалізації хвильової функції. Це підтверджує і Рис. 3.11, де наведено розподіл квадрата модуля хвильової функції при $\zeta = 0.85$ для трьох різних значень відстані між домішками.

На Рис. 3.12 зображено залежність точки зміни локалізації R_m від заряду домішок. Вона визначається з умови $\zeta C(R) = |\varepsilon_0|$. Оскільки зміна локалізації відбувається лише тоді, коли енергія електрона в полі однієї домішки є від'ємною, то звідси виникає обмеження знизу на заряд домішок $\zeta_{min} \approx 0.71$, причому $\varepsilon_0(\zeta_{min}) = 0$. В методі ЛКАО заряд має ще і обмеження згори $\zeta_{max} = \zeta_{cr} \approx 0.99$, бо при більших значеннях атомні орбіталі $|\Psi_{\pm}\rangle$ та енергія ε_0 стають комплексними. В околі мінімального значення заряду $\varepsilon_0(\zeta) \approx -\varkappa(\zeta - \zeta_{min})$, де \varkappa - модуль кутового коефіцієнта нахилу кривої $\varepsilon_0(\zeta)$ при $\zeta = \zeta_{min}$. Враховуючи асимптотичну поведінку кулонівського інтеграла (3.45), маємо закон, за яким розбігається R_m в околі ζ_{min} :

$$R_m(\zeta) \approx \frac{1}{\varkappa} \frac{\zeta}{\zeta - \zeta_{min}},\tag{3.50}$$

що і відображено на Рис. 3.12.

Треба зазначити, що схоже явище зміни локалізації хвильової функції відбувається при народженні кварк-антикваркових пар при поділі мішка важкого кварконію (див. [82] і § 20.4 в [11]). Важкий кварконій описується як два важких кварки із зарядами Q і -Q всередині мішка. Коли мішок деформується, і відстань між кварками зростає, рівні енергії легких кварків в полі такого "диполя" з важких кварків поводить себе аналогічним чином до описаного в нашій моделі. Коли деформація перевищує деяке критичне значення, відбувається зміна локалізації хвильової функції легкого кварка, що інтерпретується [11,82] як спонтанне народження легкої кваркової пари, що екранує пару важких кварків.



Рис. 3.12. Залежність точки зміни локалізації від заряду домішок.

3.4 Варіаційний метод

У цьому підрозділі застосуємо варіаційний метод Гальоркіна–Канторовича (ГК) для отримання чисельного розв'язку системи рівнянь (3.3). Оберемо пробні функції у вигляді розкладу по базисних функціях —

степенях змінної y, також явним чином виділимо правильну асимптотику на великих відстанях (3.28) та врахуємо умови (3.5):

$$\begin{pmatrix}
\phi(x,y) = e^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} \left[\sum_{k=0}^N f_{2k}(x)y^{2k} + i \sum_{k'=1}^{N'} f_{2k'-1}(x)y^{2k'-1} \right], \\
\chi(x,y) = -ie^{-\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} \left[\sum_{k=0}^N g_{2k}(x)y^{2k} + i \sum_{k'=1}^{N'} g_{2k'-1}(x)y^{2k'-1} \right].$$
(3.51)

Відповідно до методу ГК, підставимо пробні функції до рівнянь і вимагатимемо ортогональності нев'язки до базисних функцій по змінній y. В результаті отримаємо наступну систему звичайних диференціальних рівнянь $(l = \overline{0,N}, \ l' = \overline{1,N'})$:

$$\begin{split} \sum_{k=0}^{N} \left[P_{k+l} \left(\frac{df_{2k}(x)}{dx} - (1+\varepsilon)g_{2k}(x) \right) - \\ &- \sqrt{1-\varepsilon^2} \left(x - \frac{R}{2} \mathrm{sign}(x) \right) Q_{k+l} f_{2k}(x) + V_{k+l} g_{2k}(x) \right] - \\ &- \sum_{k'=1}^{N'} \left[(2k'-1)P_{k'+l-1} - \sqrt{1-\varepsilon^2}Q_{k'+l} \right] f_{2k'-1}(x) = 0, \quad (3.52a) \\ \sum_{k'=1}^{N'} \left[P_{k'+l'-1} \left(\frac{df_{2k'-1}(x)}{dx} - (1+\varepsilon)g_{2k'-1}(x) \right) - \\ &- \sqrt{1-\varepsilon^2} \left(x - \frac{R}{2} \mathrm{sign}(x) \right) Q_{k'+l'-1} f_{2k'-1}(x) + V_{k'+l'-1} g_{2k'-1}(x) \right] + \\ &+ \sum_{k=0}^{N} \left[2kP_{k+l'-1} - \sqrt{1-\varepsilon^2}Q_{k+l'} \right] f_{2k}(x) = 0, \quad (3.526) \\ \sum_{k=0}^{N} \left[P_{k+l} \left(\frac{dg_{2k}(x)}{dx} - (1-\varepsilon)f_{2k}(x) \right) - \\ &- \sqrt{1-\varepsilon^2} \left(x - \frac{R}{2} \mathrm{sign}(x) \right) Q_{k+l} g_{2k}(x) - V_{k+l} f_{2k}(x) \right] + \\ &+ \sum_{k'=1}^{N'} \left[(2k'-1)P_{k'+l-1} - \sqrt{1-\varepsilon^2}Q_{k'+l} \right] g_{2k'-1}(x) = 0, \quad (3.52b) \end{split}$$

$$\sum_{k'=1}^{N'} \left[P_{k'+l'-1} \left(\frac{dg_{2k'-1}(x)}{dx} - (1-\varepsilon)f_{2k'-1}(x) \right) - \sqrt{1-\varepsilon^2} \left(x - \frac{R}{2} \operatorname{sign}(x) \right) Q_{k'+l'-1}g_{2k'-1}(x) - V_{k'+l'-1}f_{2k'-1}(x) \right] - \sum_{k=0}^{N} \left[2kP_{k+l'-1} - \sqrt{1-\varepsilon^2}Q_{k+l'} \right] g_{2k}(x) = 0, \quad (3.52r)$$

де функції-коефіцієнти мають вигляд (відповідні інтеграли обчислюються в Додатку Б.1):

$$P_s(x) = \int_{0}^{+\infty} e^{-2\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} y^{2s} dy = \frac{\tilde{x}^{s+1}(2s-1)!!}{\alpha^s} K_{s+1}(\alpha \tilde{x}),$$
(3.53)

$$Q_{s}(x) = \int_{0}^{+\infty} e^{-2\sqrt{1-\varepsilon^{2}}\sqrt{(|x|-R/2)^{2}+y^{2}+r_{0}^{2}}} \frac{y^{2s}}{\sqrt{(|x|-R/2)^{2}+y^{2}+r_{0}^{2}}} dy = \frac{\tilde{x}^{s}(2s-1)!!}{\alpha^{s}} K_{s}(\alpha \tilde{x}), \qquad (3.54)$$

$$V_s(x) = \int_{0}^{+\infty} e^{-2\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(|x|-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} v(x,y) \ y^{2s} dy.$$
(3.55)

Тут $v(x,y) = \zeta \left(\frac{1}{\sqrt{(x-R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} - \frac{1}{\sqrt{(x+R/2)^2 + y^2 + r_0^2}} \right)$ – потенціал диполя, $K_{\nu}(z)$ – функція Макдональда, а також введені наступні позначення: $\alpha = 2\sqrt{1-\varepsilon^2}, \ \tilde{x} = \sqrt{\left(|x| - \frac{R}{2}\right)^2 + r_0^2}, \ z = \alpha \tilde{x}$. На жаль, функція (3.55) не виражається в термінах елементарних чи спеціальних функцій. Але її можна подати у вигляді такого ряду:

$$V_{s}(x) = \zeta \operatorname{sign}(x) \ \tilde{x}^{2s} \int_{1}^{+\infty} e^{-zr} (r^{2} - 1)^{s - 1/2} \left(1 - \frac{r}{\sqrt{r^{2} + a^{2}}} \right) dr =$$
$$= \zeta \operatorname{sign}(x) \ \tilde{x}^{2s} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{(2n-1)!!}{2^{n} n!} a^{2n} I_{s,n}(z), \quad (3.56)$$

де $a^2 = \frac{2|x|R}{\tilde{x}^2}$, а функції $I_{s,n}(z)$ виражаються через *G*-функцію Мейєра (див. Додатки Б.1, Б.2):

$$I_{s,n}(z) = \int_{1}^{+\infty} e^{-zr} (r^2 - 1)^{s - 1/2} \frac{dr}{r^{2n}} = \frac{(2s - 1)!!}{2^{s + 1}} G_{13}^{30} \left(\frac{z^2}{4} \middle| \begin{array}{c} n + \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}, 0, (n - s) \end{array} \right). \quad (3.57)$$

З умови того, що функції $f_i(x), g_i(x)$ мають бути скінченними при $x \to \pm \infty$, можна визначити спектр.

Цей же метод може бути застосований для розв'язання рівняння Дірака для електрона в полі одного кулонівського центра, регуляризований потенціал якого має вигляд $V(r) = -\frac{\zeta}{\sqrt{r^2+r_0^2}}$. Треба покласти R = 0 у формулах (3.52)–(3.55) і взяти до уваги, що $V_s(x) = -\zeta Q_s(x)$. На Рис. 3.13 наведено точний спектр електрона і наближені спектри, отримані варіаційним методом ГК з різною кількістю доданків у анзаці. Бачимо, що наближення з N = 0, N' = 0 та N = 1, N' = 1 краще за інші описують точний спектр.

Саме тому у випадку диполя на Рис. 3.14 зображено залежність енергії електрона від відстані між домішками при $\zeta = 0.85$ лише в наближеннях N = 0, N' = 0 та N = 1, N' = 1. Вони дають досить близькі результати, тому в подальшому будемо використовувати лише наближе-



Рис. 3.13. Точний спектр одного кулонівського центра (синя крива) і наближені спектри, отримані варіаційним методом ГК з різною кількістю доданків у анзаці (3.51): N = 0, N' = 0 (червона штрихова крива), N = 1, N' = 0 (чорна пунктирна крива), N = 0, N' = 1 (фіолетова штрих-пунктирна крива), та N = 1, N' = 1 (зелена штрих-пунктирна крива). Значення параметра $r_0 = 0.05R_{\Delta}$.

ння з N = 0, N' = 0, оскільки воно простіше у реалізації.

На Рис. 3.15 зеленими штриховими кривими зображені рівні енергії електрона в полі диполя для $\zeta = 0.6$, обчислені варіаційним методом з одним доданком в анзаці (N = 0, N' = 0). Значення регуляризуючого параметра $r_0 = 0.05R_{\Delta}$. Відштовхування рівнів не спостерігається, а відповідна хвильова функція не зазнає зміни локалізації (див. Рис. 3.16). З Рис. 3.7, на якому зображено спектр одного центра, можна впевнитися, що рівень енергії для заряду $\zeta_1 = 0.6$ не перетинає значення $\varepsilon_0 = 0$.

Для більшого значення заряду $\zeta = 0.85$ рівні енергії зображені синіми суцільними кривими на Рис. 3.15. Значення регуляризуючого параметра $r_0 = 0.05R_{\Delta}$. З Рис. 3.7 впевнюємося, що в цьому випадку рівень енергії електрона перетинає значення $\varepsilon_0 = 0$. Тому тут спостерігається відштовхування рівнів, а відповідна хвильова функція зазнає зміни локалізації (див. Рис. 3.17). При зростанні відстані між домішками електрон із найвищого заповненого стану (нижня крива енергії) змінює свою локалізацію з негативно зарядженої домішки на позитивно заряджену, тим самим екрануючи її. Натомість, поблизу негативно зарядженої домі-



Рис. 3.14. Наближений спектр електрона в потенціалі диполя, обчислений варіаційним методом ГК для $\zeta = 0.85$, $r_0 = 0.05R_{\Delta}$ і різної кількості доданків у анзаці (3.51): N = 0, N' = 0 (червоні штрихові криві) і N = 1, N' = 1 (сині суцільні криві).



Рис. 3.15. Рівні енергії в задачі з диполем, обчислені варіаційним методом ГК з N=0, N'=0 (один доданок в анзаці) для різних значень зарядів домішок: $\zeta = 0.6$ – зелені штрихові криві; $\zeta = 0.85$ – сині суцільні криві.



Рис. 3.16. Квадрат модуля хвильової функції для $\zeta = 0.6$ і різних відстаней між домішками: $R_1 = 1.25$ (зліва), $R_2 = 2.0$ (посередині), та $R_3 = 3.0$ (справа). Зміни локалізації немає.



Рис. 3.17. Квадрат модуля хвильової функції для $\zeta = 0.85$ і різних відстаней між домішками: $R_1 = 1.0$ (зліва), $R_2 = 2.55$ (посередині), та $R_3 = 3.0$ (справа). Хвильова функція змінює свою локалізацію.



Рис. 3.18. Порівняння спектрів, отриманих методами ЛКАО (сині штрихові криві) і варіаційним методом ГК з N=1, N'=1 (червоні суцільні криві) для $\zeta=0.85, r_0=0.05R_{\Delta}$.

шки залишається дірка і екранує її. Загалом маємо народжену з вакууму електронно-діркову пару, що частково заекранувала домішки.

Корисно порівняти результати, отримані методом ЛКАО та варіаційним методом. Спектри, отримані цими методами для $\zeta = 0.85$, наведені на Рис. 3.18. Бачимо досить добре узгодження результатів.

3.5 Асиметричний випадок

У попередніх двох підрозділах досліджувалося явище надкритичної нестабільності для квазічастинок у графені в полі електричного диполя. Воно пов'язане зі зміною локалізації хвильової функції найвищого заповненого електронного стану. Ми побачили, що необхідною умовою виникнення такої надкритичності є те, що заряд домішок є достатньо великим для того, щоб енергія основного стану електрона в полі одного центра перетнула значення $\varepsilon_0 = 0$. Оскільки існує також зарядово спряжений рівень з протилежним значенням енергії, то разом вони мають перекривати інтервал енергій 2Δ . Пригадаймо, що надкритична нестабільність в задачі з одним зарядженим центром настає тоді, коли основний стан електрона перетинає ту ж відстань 2Δ . Тому можна зробити припущення, що в задачі з двома різнойменними, але не рівними за модулем зарядами надкритична нестабільність настане тоді, коли енергії зв'язаних станів електрона і дірки разом подолають відстань по енергії 2Δ . Такий асиметричний випадок буде розглянуто в цьому розділі.

Запишемо гамільтоніан задачі:

$$\hat{H} = -i\hbar v_{\rm F}(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y) + \Delta \sigma_z + V(x,y), \qquad (3.58)$$

де регуляризований потенціал двох домішок має вигляд $(Z_1, Z_2 > 0)$:

$$V(x,y) = e^{2} \left(\frac{Z_{1}}{\sqrt{(x-R/2)^{2} + y^{2} + r_{0}^{2}}} - \frac{Z_{2}}{\sqrt{(x+R/2)^{2} + y^{2} + r_{0}^{2}}} \right).$$
(3.59)

У термінах безрозмірних величин рівняння Дірака набуде форми (3.3). Як і в симетричному випадку, гамільтоніан Дірака (3.58) з потенціалом (3.59) має дискретну симетрію (3.4). Тому компоненти хвильової функції $|\Psi_+\rangle$ мають задовольняти умовам (3.5).

Щоб розв'язати рівняння Дірака (3.3), застосуємо варіаційний метод ГК. Пробні функції оберемо в такому ж вигляді, як і для симетричного випадку (3.51). Відповідно до методу ГК, підставимо пробні функції до рівняння Дірака і вимагатимемо ортогональності нев'язки до базисних функцій за змінною *y*. В результаті отримаємо ідентичну до (3.52) си-



Рис. 3.19. Рівні енергії в задачі з двома різнойменно зарядженими центрами, обчислені варіаційним методом ГК з N = 0, N' = 0 (один доданок в анзаці) для різних значень зарядів домішок: $\zeta_1 = 0.5$, $\zeta_2 = 0.8$ – червоні штрихові криві; $\zeta_1 = 0.7$, $\zeta_2 = 0.95$ – сині суцільні криві.



Рис. 3.20. Квадрат модуля хвильової функції для $\zeta_1 = 0.5$, $\zeta_2 = 0.8$ і різних відстаней між домішками: $R_1 = 2.5$ (зліва), $R_2 = 3.0$ (посередині) та $R_3 = 4.0$ (справа). Зміни локалізації немає.

стему звичайних диференціальних рівнянь з функціями-коефіцієнтами (3.53)–(3.55). Єдиною відмінністю є те, що функції (3.55) повинні бути обчислені з потенціалом (3.59). Вимога, що функції $f_i(x)$ та $g_i(x)$ мають бути скінченними при $x \to \pm \infty$ дозволяє визначити спектр.

На Рис. 3.19 червоними штриховими кривими зображені рівні енергії у випадку двох різнойменно заряджених центрів із зарядами $\zeta_1 = 0.5$ та $\zeta_2 = 0.8$, обчислені варіаційним методом з одним доданком в анзаці (N = 0, N' = 0). Значення регуляризуючого параметра $r_0 = 0.05R_{\Delta}$. Відштовхування рівнів не спостерігається, а відповідна хвильова функція не зазнає зміни локалізації (див. Рис. 3.20). З Рис. 3.7, на якому зображено



Рис. 3.21. Квадрат модуля хвильової функції для $\zeta_1 = 0.7, \zeta_2 = 0.95$ і різних відстаней між домішками: $R_1 = 2.0$ (зліва), $R_2 = 3.25$ (посередині) та $R_3 = 3.75$ (справа). Хвильова функція змінює свою локалізацію.

спектр одного центра, можна впевнитися, що рівні енергії для зарядів $\zeta_1 = 0.5$ і $\zeta_2 = 0.8$ разом перетинають відстань по енергії ~ $1.75\Delta < 2\Delta$.

Для більших значень зарядів $\zeta_1 = 0.7$ і $\zeta_2 = 0.95$ рівні енергії зображені синіми суцільними кривими на Рис. 3.19. Значення регуляризуючого параметра $r_0 = 0.05R_{\Delta}$. З Рис. 3.7 впевнюємося, що для зарядів $\zeta_1 = 0.7$ і $\zeta_2 = 0.95$ рівні енергії електрона в полі кожного окремо взятого з них разом перетинають відстань по енергії ~ $2.3\Delta > 2\Delta$. Тому тут спостерігається відштовхування рівнів, а відповідна хвильова функція зазнає зміни локалізації (див. Рис. 3.21). При зростанні відстані між домішками електрон із найвищого заповненого стану (нижня крива енергії) змінює свою локалізацію з негативно зарядженої домішки на позитивно заряджену, тим самим екрануючи її. Натомість, поблизу негативно зарядженої домішки залишається дірка і екранує її. Загалом маємо народжену з вакууму електронно-діркову пару, що частково заекранувала домішки.

3.6 Висновки до розділу 3

У даному розділі в континуальній границі досліджується надкритична нестабільність для квазічастинок у графені зі щілиною в зонному спектрі в потенціалі електричного диполя, утвореного двома протилежно зарядженими домішками. Рівняння Дірака в даній задачі не допускає розділення змінних, тому використовуються наближені методи. Щоб обчислити спектр та хвильові функції електрона в полі диполя застосовується метод лінійних комбінацій атомних орбіталей (ЛКАО). Він є досить простим у реалізації і дозволяє більшість розрахунків проводити аналітично, хоча, натомість, незастосовний при малих відстанях між домішками. Альтернативно, проводяться розрахунки варіаційним методом ГК, де в якості пробних обрані функції, що мають правильну асимптотику на великих відстанях. Результати, отримані обома методами, як якісно, так і кількісно досить добре узгоджуються між собою.

Якщо заряди кожного з центрів є достатньо великими, щоб найнижчий зв'язаний стан електрона в полі одного з них перетинав рівень E = 0 (тобто разом рівні електрона і дірки перекривають інтервал 2Δ), то при поступовому збільшенні відстані між центрами від нуля до нескінченності рівні електрона і дірки спочатку виходять із відповідних континуумів і наближаються один до одного, прагнучи перетнутися, але (в силу теореми про неперетинання Вігнера-фон Неймана) не перетинаються, 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 найвищому заповненому стані 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 випадку надкритичної нестабільності з однойменно зарядженими домішками, 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 2 Δ , таких явищ не спостерігається. Тому надкритична нестабільність у полі диполя має пороговий характер.

Результати узагальнені на асиметричний випадок, коли заряди домішок є різнойменними, але відрізняються за абсолютним значенням. Цим доведено універсальність явища зміни локалізації хвильової функції. Вона відбувається тоді, коли рівні енергії електрона і дірки разом перекривають відстань по енергії 2 Δ .

За матеріалами цього розділу опубліковано статті [16,17].

РОЗДІЛ 4 НАДКРИТИЧНА НЕСТАБІЛЬНІСТЬ У СИСТЕМАХ ІЗ ДИСКРЕТНИМ СПЕКТРОМ

4.1 Вступ

У цьому розділі розглядається явище надкритичної нестабільності у системах, де спектр електронів є виключно дискретним. Таке квантування енергії виникає, наприклад, у листі графену скінченного розміру, а також за наявності зовнішнього магнітного поля. За таких умов континууми в спектрі відсутні, а тому надкритичний атомний колапс у традиційному розумінні виникнути не може. З іншого боку, при поступовому збільшенні заряду домішки у поведінці спектру та хвильових функцій прослідковуються деякі риси, які аналогічні до тих, що відбуваються у стандартному підході. Зокрема, можна виділити момент, коли один зі зв'язаних станів підходить впритул до групи рівнів, які розташовані нижче по енергії (т. зв. нижнього квазіконтинууму), і без перетину приєднується до цієї групи. Хвильові функції станів із нижнього квазіконтинууму після цього відчувають збурення, в них виникають гострі піки біля початку координат. Це відповідає виникненню резонансного стану у нижньому континуумі в надкритичному режимі. Таким чином, навіть за наявності лише дискретних рівнів у спектрі в системі може виникати надкритична нестабільність, хоч і в дещо іншому прояві.

Будь-яке середовище реагує на дію зовнішніх потенціалів. Це означає, що внесені заряди обов'язково зазнають екранування, яке послаблює їх. За це відповідає статична поляризаційна функція середовища. Для графену у магнітному полі ця функція дуже сильно залежить від положення хімічного потенціалу відносно рівнів Ландау. Положенням хімічного потенціалу можна легко керувати за допомогою напруги затвору, тому виникає можливість плавно змінювати ефективний заряд домішки. Це створює дуже зручні умови для спостереження явища надкритичної нестабільності.

Розділ побудований наступним чином. У підрозділі 4.2 розглядається надкритична нестабільність у полі однієї домішки на скінченному листі графену, де дискретний спектр виникає за рахунок розмірного квантування. Підрозділ 4.3 присвячений вивченню спектру та хвильових функцій електрона в полі зарядженої домішки у магнітному полі. У підрозділі 4.4 до розгляду беруться поляризаційні ефекти, які дозволяють за допомогою напруги затвору змінювати ефективний заряд домішки. Нарешті, у підрозділі 4.5 наводяться висновки до розділу.

4.2 Заряджена домішка на скінченному листі графену

Розглянемо задачу про одну заряджену домішку, розміщену на скінченному листі графену. Як відомо, в континуальній границі низькоенергетичні електронні збудження графену описуються безмасовим (2+1)вимірним рівнянням Дірака. Використанням спеціальних підкладок можна досягти відкриття масової щілини в спектрі електронів, тоді в гамільтоніані буде присутній ще й масовий доданок:

$$\hat{H} = -i\hbar v_F \left(\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y\right) + \Delta \sigma_z - \frac{Ze^2}{\kappa} v(r), \qquad (4.1)$$

де κ – діелектрична проникність підкладки, а v(r) – функція, що описує регуляризований потенціал однієї зарядженої домішки. Оберемо цю функцію в наступному вигляді:

$$v(r) = \frac{1}{\sqrt{r^2 + a^2}},\tag{4.2}$$

де *a* –параметр регуляризації потенціалу. Регуляризація такого типу є природною для графену, адже такий потенціал створює домішка, яка розміщена не в площині графену, а дещо зміщена в третій вимір на відстань *a*. Експериментально це просто реалізується шляхом розміщення домішки в товщі підкладки, неподалік від поверхні, на якій лежить графен.

Для зручності обчислень проведемо обезрозмірення. В подальшому без зміни позначень усі енергетичні величини виражатимуться в одиницях квазічастинкової щілини Δ , а всі відстані – в одиницях відповідної "комптонівської" довжини хвилі $\lambda_{\Delta} = \frac{\hbar v_F}{\Delta}$. Також введемо позначення $\zeta = Z\alpha/\kappa = \frac{Ze^2}{\hbar v_F\kappa}$ – величина, що характеризує силу потенціалу.

Розглянемо ділянку графену у формі диска досить великого радіуса R, в центрі якого знаходиться домішка. На краю цього диска задамо боголюбівські граничні умови: вважатимемо, що за межами диска носії заряду мають дуже велику масову щілину $\Delta' = M\Delta$, $M \gg 1$. Фізичний зміст таких граничних умов з'ясується згодом.

Оскільки і потенціал, і граничні умови мають аксіальну симетрію, то зберігається момент імпульсу (точніше, його проекція на вісь, перпендикулярну до площини графену). Допускається розділення змінних у полярних координатах (r, θ) :

$$\Psi = \begin{pmatrix} e^{-i(m+1)\theta} f(r) \\ -ie^{-im\theta} g(r) \end{pmatrix}.$$
(4.3)

Після такої підстановки рівняння Дірака $(\hat{H} - \varepsilon)\Psi = 0$ у компонентах запишеться наступним чином:

$$\begin{cases} f' + \frac{m+1}{r}f = (1 + \varepsilon + \zeta v(r))g, \\ g' - \frac{m}{r}g = (1 - \varepsilon - \zeta v(r))f. \end{cases}$$

$$(4.4)$$

Задача з регуляризованим потенціалом Кулона допускає лише чисельний розв'язок. Але спочатку дослідимо асимптотичну поведінку розв'язків у двох граничних випадках.

1. У малому околі домішки $r \to 0, v(r) \approx v(0) = v_0 \gg \{|\varepsilon|, 1\}$. При $m \ge 0$ здійснимо заміну $f = r^m \varphi(r), g = r^m \chi(r)$, тоді виразимо одну компоненту через другу і отримаємо наближене рівняння

$$\varphi'' + \frac{2m+1}{r}\varphi' + \left(\zeta^2 v_0^2 - \frac{(2m+1)}{r^2}\right)\varphi = 0, \qquad (4.5)$$

регулярним розв'язком якого є $\varphi(r) \sim r$. Тоді друга компонента $\chi(r) \sim \text{const}$ при $r \to 0$. Тому слід обирати граничні умови в нулі при чисельному інтегруванні системи рівнянь на радіальні функції в наступному вигляді:

$$\varphi(0) = 0, \, \chi(0) = 1. \tag{4.6}$$

При m < 0 здійснимо заміну $f = r^{-m-1}\varphi(r), g = r^{-m-1}\chi(r),$ тоді виразимо одну компоненту через другу і отримаємо наближене рівняння

$$\chi'' - \frac{2m+1}{r}\chi' + \left(\zeta^2 v_0^2 + \frac{(2m+1)}{r^2}\right)\chi = 0, \qquad (4.7)$$

регулярним розв'язком якого є $\chi(r) \sim r$. Тоді друга компонента $\varphi(r) \sim \text{const}, r \to 0$. Тому слід обирати граничні умови в нулі при

чисельному інтегруванні системи рівнянь на радіальні функції в наступному вигляді:

$$\varphi(0) = 1, \, \chi(0) = 0.$$
 (4.8)

2. Поза межами графенового листа r > R. $M \gg \{1, |\varepsilon|\} \gg v(r)$, тоді також можна просто виразити одну компоненту через іншу і отримати рівняння:

$$f'' + \frac{f'}{r} - \left(M^2 + \frac{(m+1)^2}{r^2}\right)f = 0,$$
(4.9)

скінченний при $r \to \infty$ розв'язок якого виражається через функцію Макдональда [72]:

$$f = f_0 K_{-m-1}(Mr). (4.10)$$

Відповідна друга компонента має вигляд:

$$g(r) \approx \frac{f' + \frac{m+1}{r}f}{M} = -f_0 K_{-m}(Mr),$$
 (4.11)

де враховано властивість функцій Макдональда: $K'_{\nu}(z) - \frac{\nu}{z}K_{\nu}(z) = -K_{\nu+1}(z)$. Враховуючи асимптотичну поведінку функцій Макдональда на нескінченності $K_{\nu}(z) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2z}}e^{-z}$, у границі $M \to \infty$ відношення $\frac{f(R)}{g(R)} \to -1$, тому гранична умова на краю диска запишеться наступним чином:

$$(f+g)|_{r=R} = 0. (4.12)$$

Ця гранична умова відповідає нульовому струмові через границю

області:

$$j_r = j_x \cos \theta + j_y \sin \theta = \bar{\Psi}(\gamma_x \cos \theta + \gamma_y \sin \theta)\Psi =$$
$$= \Psi^{\dagger}(\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta)\Psi = -i(f^*g - g^*f) = |f = -g| = 0. \quad (4.13)$$

Таким чином, задача зводиться до інтегрування системи рівнянь (4.4) з граничними умовами в нулі (4.6) та на краю області (4.12). Оскільки система є обмеженою в просторі, спектр її буде дискретним (при великих R він буде чисто дискретним всередині щілини і буде уподібнюватися неперервному за її межами). Рівні енергії можна знайти за допомогою шутінг-методу: за фіксованого довільного значення енергії інтегруємо систему рівнянь (4.4) з використанням початкової умови (4.6) і обчислюємо величину [f(R) + g(R)]. Змінюючи значення енергії, добиваємося того, щоб ця величина якомога точніше дорівнювала нулю, тобто виконувалася умова (4.12).

Наведемо результати чисельного аналізу. Використано значення регуляризуючого параметра a = 0.01 і радіуса обмежуючого диска R = 10. Основний стан (для нескінченного графену) має квантове число m = -1, тому всі графіки наводяться саме для цього значення.

На Рис. 4.1 наведено залежності енергій дискретних рівнів у системі від заряду домішки. Синій кривій у випадку нескінченного листа графену відповідає основний зв'язаний стан, червоним кривим – нижній континуум неперервного спектру, зеленим кривим – верхній континуум та решта зв'язаних станів. Цікаво розглянути поведінку хвильових функцій після занурення першого зв'язаного стану до нижнього континууму. З цією метою наводяться графіки радіальної функції розподілу $W(r) = \frac{2\pi r}{N}(|f(r)|^2 + |g(r)|^2), \text{ де } N = \int_{0}^{R} 2\pi r(|f(r)|^2 + |g(r)|^2)dr.$ Графіки наводяться для докритичного значення заряду $\zeta = 0.7$ (Рис. 4.2) та слабко надкритичного значення заряду $\zeta = 0.763$ (Рис. 4.3) (їм відповідають яскраво зелені точки на синій і червоній кривих на Рис. 4.1).

З графіків видно, що після переходу через точку максимального зближення кривих відбувається зміна локалізації хвильових функцій між ними. Нехай основний зв'язаний стан (синя крива енергії) спочатку був незаповнений (т. зв. "гола" домішка). Всі червоні рівні (нижній квазіконтинуум) є заповненими. При переході через точку максимального зближення кривих, електронна густина на першому заповненому рівні (найвища червона крива) локалізується на домішці (маємо електрон, що екранує заряд домішки). А на синій кривій, яка тепер уже теж приєднується до квазіконтинууму, електрона немає. Це стандартним чином інтерпретується за допомогою зарядового спряження, як дірка з тією ж масою і додатним зарядом. Як видно з лівого графіка на рис. 4.3, ця дірка локалізується на периферії області.

На Рис. 4.4 для порівняння наведено "діркову" густину (радіальну функцію розподілу дірок для надкритичних значень заряду) для двох значень радіуса, що обмежує область: R = 10 (синя крива) і R = 15(зелена крива). Бачимо, що при збільшенні обмежуючого радіуса, зростає і відстань, на якій локалізується дірка. Тобто у граничному випадку $R \to \infty$ дірка делокалізується і є вільною.

Остаточно, маємо народжену з вакууму електронно-діркову пару, електрон локалізується на К-оболонці домішки, екрануючи її заряд, а дірка є вільною і летить на нескінченність. При збільшенні обмежуючого радіуса *R* континуальні рівні йдуть дуже часто, через це локалізований електрон не має одночастинкової хвильової функції, а "розмазаний" по деякій області в континуумі. Це можна побачити з того, що на графіку для діркової густини (див. лівий графік на Рис. 4.3) біля початку координат є невеликий пік, що відповідає локалізації на домішці. Такі піки є



Рис. 4.1. Залежності енергій дискретних рівнів електрона в полі однієї домішки від її заряду. *a* = 0.01, *R* = 10. Яскраво-зеленими точками відмічено значення заряду, для яких на наступних графіках побудовані радіальні функції розподілу.

у кількох перших функцій континууму в надкритичному режимі. Але їх інтенсивність поступово падає по мірі віддалення від краю континууму (див. Рис. 4.5, де зображено хвильові функції 2, 3, 4, і 5 рівня нижнього квазіконтинууму для надкритичного значення заряду $\zeta = 0.763$). Ситуація є цілком аналогічною до описаної в роботах [11,76], де розглядаються явища в електродинаміці (3+1)-вимірних обмежених систем.

При подальшому зростанні заряду домішки, електронна густина, що на ній локалізується (гострий пік в околі початку координат на графіках радіальної функції розподілу), буде "естафетою" передаватися до все глибших і глибших рівнів нижнього квазіконтинууму. Це цілком відповідає ситуації для нескінченного графенового листа, коли після занурення до нижнього континууму енергій нижній зв'язаний стан електрона перетворюється в резонанс скінченної ширини і при зростанні заряду домішки він все далі зміщується вглиб континууму.



Рис. 4.2. Радіальна функція розподілу електронної густини для докритичного значення заряду $\zeta = 0.7$ (перша пара яскраво-зелених точок на рис. 4.1). Лівий графік відповідає синій кривій енергії і являє собою електронну густину основного стану, локалізовану на домішці. Правий графік відповідає червоній кривій енергії і являє собою першу з хвильових функцій квазіконтинууму (не локалізована на домішці).



Рис. 4.3. Радіальна функція розподілу електронної густини для слабко надкритичного значення заряду $\zeta = 0.763$ (друга пара яскраво-зелених точок на рис. 4.1). Лівий графік відповідає синій кривій енергії і являє собою хвильову функцію квазіконтинууму, яка локалізується на периферії. Правий графік відповідає червоній кривій енергії і схожий на електронну густину основного стану, локалізовану на домішці.



Рис. 4.4. Радіальна функція розподілу дірок для надкритичних значень заряду для двох значень радіуса, що обмежує область: R = 10 (синя крива) і R = 15 (зелена крива).


Рис. 4.5. Радіальна функція розподілу електронної густини для слабко надкритичного значення заряду $\zeta = 0.763$ для 2, 3, 4 і 5 рівнів нижнього квазіконтинууму (кількість піків без нульового відповідає номеру рівня в континуумі). Енергії цих рівнів зображені 2, 3, 4, і 5 червоними кривими на Рис. 4.1.

4.3 Заряджена домішка у магнітному полі

Тепер дослідимо електронні стани у графені з однією зарядженою домішкою в магнітному полі. 2D гамільтоніан Дірака, що описує низькоенергетичні квазічастинкові стани в потенціалі зарядженої домішки у магнітному полі має наступний вигляд:

$$\hat{H} = v_F \boldsymbol{\sigma} \hat{\boldsymbol{\pi}} + V(\mathbf{r}), \qquad (4.14)$$

де $\hat{\pi} = -i\hbar \nabla + \frac{e}{c} \mathbf{A}$, -e < 0 – заряд електрона, векторний потенціал в симетричному калібруванні $\mathbf{A} = B/2(-y, x)$ описує магнітне поле, перпендикулярне до площини графену, а $\boldsymbol{\sigma}$ – вектор із матриць Паулі. Хоча внаслідок явища магнітного каталізу [35] ненульова щілина завжди генерується в графені у перпендикулярному магнітному полі [50,51], ця щілина є досить малою для реалістичних магнітних полів. Тому для простоти розгляду знехтуємо нею в подальших обчисленнях.

Гамільтоніан (4.14) діє на двокомпонентні спінори $\Psi_{\xi s}$, які несуть долинний ($\xi = \pm$) і спіновий ($s = \pm$) індекси. За стандартною домовленістю, $\Psi_{+s}^{T} = (\psi_{A}, \psi_{B})_{K+s}, \Psi_{-s}^{T} = (\psi_{B}, -\psi_{A})_{K-s}$, де індекси A, B відповідають за 2 нееквівалентні підґратки гексагональної ґратки графену. Як і в попередньому підрозділі, регуляризуємо кулонівський потенціал домішки, вводячи параметр a, який за порядком величини співпадає з періодом ґратки графену, хоча і перевищує його. Регуляризований потенціал домішки із зарядом Q = Ze має наступний вигляд:

$$V\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{Ze^2}{\kappa\sqrt{r^2 + a^2}},\tag{4.15}$$

де κ – відносна діелектрична проникність підкладки. Оскільки потенціал домішки (4.15) не залежить від долинного індексу і спіну, в подальших обчисленнях опустимо індекси ξ та *s* в енергіях та хвильових функціях, вважаючи для визначеності, що електрон знаходиться в долині K_+ .

Для зручності в подальших обрахунках означимо магнітну довжину $l_B = \sqrt{\hbar c/|eB|}$, яка є масштабом довжини в даній задачі, а також безрозмірну комбінацію $\zeta = Ze^2/(\hbar v_F)$, що характеризує силу "голої" домішки. Зі стратегічних міркувань у цьому підрозділі ми не включаємо діелектричну проникність підкладки κ до величини ζ , а виписуємо скрізь окремо. Це пов'язано з тим, що вона фігуруватиме не лише в комбінації з зарядом домішки, а і в деяких формулах окремо.

Оскільки потенціал має аксіальну симетрію відносно осі, що перпендикулярна до площини графену, проекція повного кутового моменту на цю вісь зберігається. Тому перейдемо до полярних координат (r, θ) і будемо шукати хвильову функцію у наступному вигляді:

$$\Psi = \frac{1}{r} \left(\begin{array}{c} e^{-i(m+1)\theta} f(r) \\ -ie^{-im\theta} g(r) \end{array} \right), \qquad (4.16)$$

де *т* називатимемо орбітальним квантовим числом. Тоді рівняння Дірака набуде форми:

$$\begin{cases} f' + \frac{m}{r}f - \frac{r}{2l_B^2}f - \frac{E - V(r)}{\hbar v_F}g = 0, \\ g' - \frac{m+1}{r}g + \frac{r}{2l_B^2}g + \frac{E - V(r)}{\hbar v_F}f = 0. \end{cases}$$
(4.17)

Ця система рівнянь не допускає аналітичного розв'язку в термінах жодних відомих спеціальних функцій, тому будемо розв'язувати її чисельно, використовуючи "шутінг"-метод. Але перед цим потрібно визначити асимптотику розв'язків при $r \to 0$, де $|V(r)| \approx |V(0)| = \frac{Ze^2}{\kappa a} \gg |E|$. Ця асимптотика різниться для орбітальних квантових чисел $m \ge 0$ і m < 0. Для $m \ge 0$, використовуючи наступну підстановку $f = r^{m+1}\varphi(r)$, $g = r^{m+1}\chi(r)$, і виражаючи одну компоненту через іншу, отримаємо наближене рівняння:

$$\varphi'' + \frac{2m+1}{r}\varphi' + \left(\frac{V^2(0)}{\hbar^2 v_F^2} - \frac{(2m+1)}{r^2}\right)\varphi = 0, \qquad (4.18)$$

яке є повністю аналогічним до рівняння (4.5) з попереднього підрозділу, незважаючи на відсутність квазічастинкової щілини і наявність магнітного поля. Це можна пояснити тим, що на малих відстанях від домішки цілком домінує її потенціал, а зазначені вище ефекти є малими. Тому, користуючись результатами попереднього підрозділу, отримаємо початкові умови на радіальні функції при $m \ge 0$ у формі (4.6), а для m < 0 - yформі (4.8).

Чисельне інтегрування системи рівнянь (4.17) відбувається насту-

пним чином. Здійснюється "постріл" з початку координат r = 0 вздовж характеристики (тобто з урахуванням початкових умов (4.6) ог (4.8)) для фіксованого значення енергії і прослідковується поведінка хвильових функцій при $r \to \infty$. Вони можуть прямувати до $+\infty$ для одних значень енергії або до $-\infty$ для інших значень. Але між цими двома випадками обов'язково існує проміжних варіант, коли вони прямують до нуля. Йому якраз і відповідає фізичний розв'язок рівняння Дірака. Пошук відповідного значення енергії проводиться методом бісекцій (поділу навпіл). Для чисельних розрахунків використовується значення магнітного поля B = 10 Тл і регуляризуючого параметра $a = 0.05l_B$.

Магнітне поле модифікує енергетичний спектр електронів у кулонівському полі зарядженої домішки, перетворюючи усі стани континууму у дискретні рівні, а також задає новий ефективний масштаб у системі, що визначається магнітною довжиною l_B . Зі свого боку, заряджена домішка знімає виродження рівнів Ландау за орбітальним квантовим числом, розщеплюючи їх у зоноподібні структури. На Рис. 4.6 суцільними лініями зображені залежності безрозмірної енергії $\varepsilon = El_B/\hbar v_F$ рівнів Ландау з орбітальним числом m = 0 і різними n від заряду домішки у магнітному полі B = 10 Тл. Синя суцільна крива зображує стан з m = 0для нульового рівня Ландау, а червоні та зелені суцільні криві – стани з нижнього та верхнього "квазіконтинуумів", відповідно. При зростанні заряду домішки синя крива спочатку наближається до червоної, а згодом приєднується до квазіконтинууму. Це явище є аналогом занурення зв'язаного стану до нижнього континууму з одночасним утворенням резонансу у системі за відсутності магнітного поля.

Відповідно до Рис. 4.6, ситуація є *якісно* відмінною у присутності магнітного поля, оскільки криві, що відповідають різним рівням, так і не перетинаються. Натомість, спостерігається типове відштовхування



Рис. 4.6. Безрозмірні енергії $\varepsilon = El_B/(\hbar v_F)$ електронних рівнів у безщілинному графені у магнітному полі B = 10 Тл як функції заряду домішки для різних орбітальних квантових чисел m. Номеру рівня Ландау (головному квантовому числу) відповідає колір кривої: n = +1 – зелений, n = 0 – синій, n = -1 – червоний; орбітальному квантовому числу відповідає тип кривої: m = -1 – пунктирні (лише для n = +1 та n = -1), m = 0 – суцільні, m = 1 – штрихові, m = 2 – штрих-пунктирні.

рівнів. Як і в попередньому підрозділі, де розглядався скінченний лист графену, таке відштовхування описується теоремою про неперетинання Вігнера-фон Неймана [62], оскільки ці підрівні мають однакову симетрію. З графіків бачимо, що зазначене відштовхування відбувається лише між підрівнями з однаковими орбітальними квантовими числами m. Наприклад, особливо гарно це явище прослідковується для рівнів n = 1, m = -1 та n = -1, m = -1, трохи менш виразно для рівнів n = 0, m = 0 та n = -1, m = 0. Стани з різними орбітальними моментами m просто перетинаються без ніякого відштовхування.

На Рис. 4.7 зображені радіальні функції розподілу електронної гу-

стини $W(r) = 2\pi r |\Psi_{nm}|^2$ для станів з m = 0 та n = 0, -1, -2 для трьох різних значень заряду домішки $\zeta/\kappa = 0.7, 1.3,$ і 1.9. Друге значення відповідає станам поблизу точки неперетинання, див. синю та червону суцільні криві на Рис. 4.6. Коли заряд домішки малий (ліва верхня панель Рис. 4.7), електронна густина слабко спотворена домішкою і радіальні функції розподілу вищезазначених станів мають 1, 2 і 3 максимуми, відповідно. Коли заряд зростає, крайні зліва максимуми на графіках W(r) зміщуються до місця розташування домішки (початку координат, r = 0), перетворюючись у гострі піки. У момент неперетинання рівнів $(\zeta/\kappa \approx 1.3,$ права верхня панель Рис. 4.7) найвищий пік має синя крива, що відповідає n = 0. До того ж, на кожній кривій з'являється додатковий максимум, що наївно відповідає зсуву на 1 нумерації рівнів Ландау. Зверніть увагу, що синя суцільна крива на нижній панелі якісно має такий же вигляд, як червона штрихова крива на лівій верхній панелі, а червона штрихова крива – як зелена штрих-пунктирна. Це означає, що після точки відштовхування рівні Ландау нумеруються вже не з 0, а з -1, а електронна густина колишнього нульового рівня Ландау у вигляді гострих піків одночасно фігурує на графіках декількох рівнів. Це якісно відповідає ситуації без магнітного поля, коли після занурення до континууму зв'язаний стан перетворюється у резонанс скінченної ширини, збурюючи хвильові функції континууму в смузі енергій, порядку ширини резонансу [41]. По мірі збільшення заряду домішки піки поблизу початку координат на графіках радіальної функції розподілу поступово мігрують до глибше лежачих рівнів. Тому на нижній панелі Рис. 4.7 ці піки вже майже непомітні.

Поки що до розгляду не бралося екранування зарядженої домішки за рахунок поляризаційних ефектів, що буде зроблено в наступному підрозділі.



Рис. 4.7. Радіальні функції розподілу електронної густини для рівнів Ландау з m = 0і n = 0 (сині суцільні криві), n = -1 (червоні штрихові криві) та n = -2 (зелені штрих-пунктирні криві) і трьох різних значень заряду домішки: $\zeta/\kappa = 0.7$ (ліва верхня панель), $\zeta/\kappa = 1.3$ (права верхня панель), $\zeta/\kappa = 1.9$ (нижня панель).

4.4 Зміна ефективного заряду домішки за рахунок поляризаційних ефектів

Силою потенціалу домішки і, як наслідок, розщепленням рівнів Ландау можна ефективно керувати за допомогою напруги затвору. Це було продемонстровано в експерименті у роботі [12]. Автори стверджують, що таке регулювання можливе завдяки екранувальним властивостям двовимірної електронної системи. Інформацію про ці властивості містить у собі статична поляризаційна функція системи. Щоб описати цей ефект теоретично, спочатку розглянемо поляризаційну функцію без урахування впливу зарядженої домішки. Беручи до уваги густину заряду, що індукується за рахунок поляризації, запишемо електростатичне рівняння Пуассона у наступному вигляді:

$$\sqrt{-\Delta_{2D}}V_{tot}^{(0)}(\mathbf{x}) = -\frac{2\pi Z e^2}{\kappa}\delta^{(2)}(\mathbf{x}) - \frac{2\pi e^2}{\kappa}\int d^2\mathbf{y}\Pi^{(0)}(\mathbf{x}-\mathbf{y};\mu)V_{tot}^{(0)}(\mathbf{y}),$$
(4.19)

де поляризаційна функція $\Pi^{(0)}(\mathbf{x} - \mathbf{y}; \mu)$ обчислюється з використанням хвильових функцій електрона за відсутності кулонівської домішки. Зверніть увагу, що у рівнянні фігурує псевдодиференціальний оператор $\sqrt{-\Delta_{2D}}$, який необхідний для правильного опису кулонівської взаємодії у розмірнісно редукованих електродинамічних системах [83–86].

Щоб отримати ефективне рівняння для планарного розподілу густини заряду у вигляді (4.19), слід розпочати з формули для потенціалу Кулона у просторі Фур'є в трьох просторових вимірах $\tilde{V}(\mathbf{q},q_z) \sim \frac{1}{\mathbf{q}^2+q_z^2}$, де \mathbf{q} – вектор імпульсу в площині, а q_z – третя компонента імпульсу, перпендикулярна до площини. Для отримання ефективного потенціалу, який створює планарний розподіл заряду, треба проінтегрувати по q_z . Тоді отримаємо, що шуканий ефективний потенціал у двовимірному Фур'є-просторі набуває вигляду $\tilde{V}_{eff}(\mathbf{q}) \sim \frac{1}{|\mathbf{q}|}$. Очевидно, що відповідний потенціал у координатному просторі задовольняє двовимірному рівнянню (4.19), де поляризаційна функція відсутня. Оскільки у правій частині рівняння фігурує повна густина заряду в системі, то індукований заряд за рахунок поляризації включається туди адитивним чином, що виражає принцип суперпозиції в електродинаміці.

У імпульсному просторі рівняння (4.19) буде алгебраїчним:

$$\left(q + \frac{2\pi e^2}{\kappa} \Pi^{(0)}(0,q;\mu)\right) V_{tot}^{(0)}(q) = -\frac{2\pi Z e^2}{\kappa}.$$
(4.20)

Розв'язуючи його та здійснюючи обернене перетворення Фур'є, можна отримати вираз для екранованого потенціалу зарядженої домішки:

$$V_{tot}^{(0)}(\mathbf{x}) = -\frac{Ze^2}{\kappa} \int \frac{d^2q}{2\pi} \frac{\exp(i\mathbf{q}\mathbf{r})}{|\mathbf{q}| + \frac{2\pi e^2}{\kappa}\Pi^{(0)}(0,q;\mu)} = -\frac{Ze^2}{\kappa} \int_{0}^{+\infty} dq \frac{q \ J_0(q|\mathbf{x}|)}{q + \frac{2\pi e^2}{\kappa}\Pi^{(0)}(0,q;\mu)}.$$
 (4.21)

Тут верхній індекс 0 відображає той факт, що поляризаційна функція обчислена по незбурених хвильових функціях, які враховують наявність лише зовнішнього магнітного поля і не містять інформації про заряджену домішку.

Статична поляризаційна функція одношарового графену в однорідному зовнішньому магнітному полі при нульовій температурі має наступний вигляд [13]:

$$\Pi^{(0)}(0,q;\mu) = \frac{N_f}{4\pi l_B^2} \Biggl\{ \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{\lambda=\pm} Q_{nn}^{\lambda\lambda} \left(\frac{q^2 l_B^2}{2}\right) \delta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n) - \sum_{\substack{n,n'=0\\\lambda n\neq\lambda' n'}}^{n_c} \sum_{\substack{\lambda=\pm\\\lambda n\neq\lambda' n'}} Q_{nn'}^{\lambda\lambda'} \left(\frac{q^2 l_B^2}{2}\right) \frac{\theta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n) - \theta_{\Gamma}(\mu - \lambda' M_{n'})}{\lambda M_n - \lambda' M_{n'}} \Biggr\}, \quad (4.22)$$

де $M_n = \frac{\hbar v_F}{l_B} \sqrt{2n}$ – енергії рівнів Ландау. Також через розбіжність однієї з сум за рівнями Ландау було означено ультрафіолетовий обрив n_c , який диктується скінченною шириною енергетичної зони у графені і чисельно оцінюється як $n_c = 10^4/B$ [Тл].

Як і в експерименті [12], розглянемо систему з двох перехрещених шарів графену, які розорієнтовані на великий кут від берналівського упорядкування [87], так що можна знехтувати переходами електронів з одного шару в інший. Це не змінює лінійного спектру одношарового графену, але дає додаткове двократне виродження, тому множник $N_f = 2_s 2_l = 4$ враховує спінове виродження, а також наявність другого шару графену. У експерименті така система з двох шарів дозволяє зменшити випадкові флуктуації потенціалу, спричинені неідеальністю підкладки. У формулі (4.22) фігурують модифіковані дельта-функція $\delta_{\Gamma}(x) = \frac{\Gamma}{\pi} \frac{1}{x^2 + \Gamma^2}$ та сходинкова функція Хевісайда $\theta_{\Gamma}(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \arctan\left(\frac{x}{\Gamma}\right)$, які моделюють уширення рівнів Ландау за рахунок наявності статистичних неоднорідностей, на яких розсіюються носії заряду. Нарешті, функції $Q_{nn'}^{\lambda\lambda'}(y)$ означені наступним чином:

$$Q_{nn'}^{\lambda\lambda'}(y) = e^{-y} y^{|n-n'|} \left(\sqrt{\frac{(1+\lambda\lambda'\delta_{0,n_{>}})n_{<}!}{n_{>}!}} L_{n_{<}}^{|n-n'|}(y) + \lambda\lambda'(1-\delta_{0,n_{<}}) \sqrt{\frac{(n_{<}-1)!}{(n_{>}-1)!}} L_{n_{<}-1}^{|n-n'|}(y) \right)^{2}, \quad (4.23)$$

де $n_{<} = \min(n, n'), n_{>} = \max(n, n')$ і $L_n^m(y)$ – узагальнені многочлени Лаггера.

Перший доданок у формулі (4.22) описує внесок від переходів всередині рівня Ландау, в той час як другий доданок представляє внески від міжрівневих переходів. Для малої ширини рівнів Ландау перший доданок виглядає як послідовність дельта-функцій, а тому дає ненульовий результат лише тоді, коли хімічний потенціал лежить всередині рівня Ландау. Для малих значень хвильового вектора ($q \ll l_B^{-1}$) поляризаційна функція (4.22) поводить себе наступним чином [13]:

$$\Pi^{(0)}(0,q;\mu) \simeq \frac{\kappa}{2\pi e^2} (q_{\rm TF} + d \cdot q^2), \qquad (4.24)$$

де хвильовий вектор Томаса-Фермі

$$q_{\rm TF} = \frac{e^2 N_f}{\kappa l_B^2} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{\lambda=\pm} (2 - \delta_{0n}) \delta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n)$$
(4.25)

визначає довгохвильове екранування зовнішніх зарядів, а параметр *d* визначається за формулою:

$$d = -\frac{e^2 N_f}{2\kappa} \sum_{n=0}^{n_c} \sum_{\lambda=\pm} (4n + \delta_{0n}) \delta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n) - \frac{e^2 N_f l_B}{2\sqrt{2\kappa\hbar} v_F} \sum_{n=0}^{n_c-1} \sum_{\lambda,\lambda'=\pm} \frac{\theta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_{n+1}) - \theta_{\Gamma}(\mu - \lambda' M_n)}{(\lambda\sqrt{n+1} - \lambda'\sqrt{n})^3}.$$
 (4.26)

Рисунок 4.8 ілюструє залежність статичної поляризаційної функції (4.22) і її перших двох довгохвильових доданків (4.25) та (4.26) від хімічного потенціалу. На Рис. 4.9 наводяться для порівняння графіки потенціалу домішки без урахування поляризаційних ефектів (синя суцільна крива) та з їх урахуванням. Розглянемо випадок, коли хімічний потенціал лежить між рівням Ландау. Тоді хвильовий вектор Томаса-Фермі (4.25) близький до нуля (див. Рис. 4.8) і кулонівський потенціал домішки екранується слабко, хоча навіть у цьому випадку графен дає внесок до повної діелектричної функції при великих і середніх імпульсах, що ефективно зменшує заряд домішки (червона штрихова крива на Рис. 4.9). Як наслідок, потенціал на великих відстанях прямує до свого неекранованого значення, в той час як при малих і середніх відстанях він помітно послаблений. З іншої сторони, коли хімічний потенціал лежить всередині рівня Ландау, екранування працює набагато ефективніше завдяки великому хвильовому вектору Томаса-Фермі $q_{\rm TF}$ (див. зелену штрих-пунктирну криву на Рис. 4.9). Це створює прекрасні передумови для регулювання сили потенціалу домішки за допомогою напруги затвору. Більше то-



Рис. 4.8. Залежність безрозмірної поляризаційної функції $\Pi = (4\pi \hbar v_F l_B/N_f)\Pi(0,q;\mu)$ від хімічного потенціалу і хвильового вектора (верхня панель), а також залежності двох перших коефіцієнтів $\tilde{q}_{\rm TF} = (2\kappa \hbar v_F l_B/e^2 N_f)q_{\rm TF}, \tilde{d} = (2\kappa \hbar v_F/e^2 N_f l_B)d$ її розкладу (4.24) від хімічного потенціалу (середня та нижня панель, відповідно).

го, коефіцієнт d, виражений формулою (4.26), в останньому випадку є від'ємним (див. нижню панель на Рис. 4.8), що означає немонотонну поведінку поляризаційної функції $\Pi^{(0)}(0,q;\mu)$ при зміні хвильового вектора з піком при q = 0. Така поведінка поляризаційної функції призводить до осциляцій екранованого потенціалу (зелена штрих-пунктирна лінія на Рис. 4.9) зі зміною його знаку (тобто переекранування потенціалу) при проміжних відстанях, порядку кількох магнітних довжин.



Рис. 4.9. Незаекранований регуляризований кулонівський потенціал (синя суцільна крива), а також екранований потенціал домішки як функції відстані r/l_B у випадках, коли хімічний потенціал лежить між рівнями Ландау (червона штрихова крива) і всередині рівня Ландау (зелена штрих-пунктирна крива).

Тепер розглянемо електронні стани. Чисельно інтегруючи рівняння Дірака з екранованим потенціалом (4.21) тим же методом, що і в попередньому підрозділі, отримаємо електронний спектр, який показує, що рівні Ландау дещо зсунуті і розщеплені на підрівні з різними квантовими числами m. Для чисельного аналізу оберемо значення заряду "голої" домішки Z = +2 і діелектричної проникності системи на поверхні кремнієвої підкладки $\kappa = (1 + \kappa_{Si})/2 = 2.5$. Енергії електронних підрівнів для кількох перших рівнів Ландау зображені на Рис. 4.10.



У загальному випадку, розщеплення рівнів Ландау за квантовим

Рис. 4.10. Енергії рівнів Ландау з $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$, розщеплені за квантовим числом m у потенціалі екранованої домішки у магнітному полі, виражені в одиницях ефективної магнітної енергії $\hbar v_F/l_B = 81.2 \text{ меВ}$ у випадку, коли хімічний потенціал лежить у проміжку між рівнями Ландау. "Голий" заряд домішки Z = +2, діелектрична проникність $\kappa = 2.5$, магнітне поле B = 10 Тл.

числом *m* може бути знайдене лише чисельними методами. Але для великих значень *m* основний внесок дає область простору, віддалена від початку координат. Там потенціал уже досить слабкий, а тому зсув підрівнів у ньому можна обчислити за теорією збурень. Незбурена хвильова функція нульового рівня Ландау для електрона у магнітному полі має наступний вигляд:

$$\Psi_{0m}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}}}{l_B\sqrt{2\pi m!}} \begin{bmatrix} 0\\ \left(\frac{r^2}{2l_B^2}\right)^{m/2} e^{-im\theta} \end{bmatrix}.$$
 (4.27)

Тому розщеплення цього рівня можна оцінити так:

$$\delta E_{0m} = \langle 0m | V_{tot}(r) | 0m \rangle = \int d^2 \mathbf{r} \ \Psi_{0m}^{(0)\dagger} V_{tot}(r) \Psi_{0m}^{(0)} = \int_{0}^{\infty} W(r) V_{tot}(r) dr,$$
(4.28)

де $W(r) = 2\pi r |\Psi_{0m}^{(0)}(\mathbf{r})|^2 = \frac{1}{2^m m! l_B^{2m+2}} e^{-r^2/(2l_B^2)} r^{2m+1}$ – радіальна функція розподілу електронної густини. При великих значеннях *m* вона має вузький і гострий пік на відстані $r_m^{peak} = l_B \sqrt{2m+1}$, яка визначається з умови екстремуму W'(r) = 0. Для великих кутових моментів *m*, розщеплення рівнів можна оцінити як $V_{tot}(r_m^{peak})$, що наближено дає значення δE_{0m} з одновідсотковою похибкою для станів з $m \geq 10$.

Завдяки додатковому виродженню $g_s g_v g_l = 8$, що пов'язане зі спіновими, долинними ступенями вільності, а також із наявністю двох графенових листів ($g_s = g_v = g_l = 2$), повна кратність виродження рівня Ландау на одиницю площі становить $n_0(B) = g_s g_v g_l(Be/hc) \approx 2 \cdot 10^{12} \,\mathrm{cm}^{-2}$ у магнітному полі $B = 10 \,\mathrm{Tr}$. Оскільки зразки, які використовуються в експерименті [12], є обмеженими за площею, в розрахунках також розглянемо зразок скінченних розмірів, $500 \times 500 \,\mathrm{m}$. Таким чином, є приблизно $N = \frac{n_0(B)S}{g_s g_v g_l} \approx 600$ підрівнів з різними квантовими числами m на кожному рівні Ландау, тому максимальне квантове число кутового моменту на n-му рівні Ландау становить $m_{max} = N - |n| - 1$. За рахунок неуникної наявності дефектів та домішок підрівні не є нескінченно тонкими, а дещо уширені. Для оцінки візьмемо значення $\Gamma = 0.05 \hbar v_F/l_B$, що використовувалося в роботі [12]. З урахуванням такого уширення, інтегральна густина станів для нульового рівня Ландау має вигляд:

$$\frac{dN(E)}{dE} = \sum_{m=0}^{m_{max}} \delta_{\Gamma}(E - \delta E_{0m}), \qquad (4.29)$$

де фігурує уширена дельта-функція $\delta_{\Gamma}(x)$, яка означена в тексті після

формули (4.22). Ця густина станів зображена на Рис. 4.11. Оскільки заряджена домішка найбільше зміщує підрівні з малими квантовими числами m, то у формулі (4.29) для $m \leq 6$ використовуються точні значення енергій підрівнів, отримані з чисельного інтегрування рівняння Дірака. Енергії ж всіх інших підрівнів оцінюються за теорією збурень, відповідно до формули (4.28), похибка якої є меншою за 1% для цих станів. Як видно з Рис. 4.11, нульовий рівень Ландау є дещо зміщеним вліво відносно свого незбуреного положення. Таким чином, при нульовій напрузі затвору (нульовому хімічному потенціалі) заповненою є більша частина цього рівня. Тому залежності $\mu(V_g)$ і, як наслідок, $\Pi^{(0)}(0,q;\mu(V_g))$ мають значну асиметрію по напрузі затвору.



Рис. 4.11. Інтегральна густина станів на нульовому рівні Ландау, який розщеплений у потенціалі зарядженої домішки.

Відповідно до даних, що наведені в роботах [1,88], типова товщина шару підкладки з оксиду кремнію SiO₂, яка використовується в експериментах, є $t \approx 300$ нм. Тому густина носіїв заряду пов'язана з напругою затвору як $n = \kappa V_g/(te) \approx \approx 7 \times 10^{10} V_g$ [B] см⁻². Беручи до уваги розміри графенового листа, кількість електронів, що з'являються в системі вна-



Рис. 4.12. Залежність хімічного потенціалу від прикладеної напруги затвору.

слідок прикладання напруги затвору, дорівнює $\Delta N = nS \approx 175 \cdot V_g[B]$. З іншої сторони, ця надлишкова кількість носіїв заряду визначається надлишковим заповненням рівня Ландау: $\Delta N = g_s g_v g_l \int_0^{\mu} \frac{dN}{dE} dE$. Таким чином, інтегруючи вираз (4.29) по енергії, отримаємо залежність $V_g(\mu) = \frac{8}{175} \int_0^{\mu} \frac{dN}{dE} dE$. Слід звернути увагу, що в загальному випадку співвідношення між густиною заряду *n* та напругою затвору V_g не є строго лінійним внаслідок ефектів квантової ємності поблизу точки Дірака. Але вимірювання, здійснені в роботах [1,88] повністю узгоджуються з лінійною залежністю, тому і тут користуємося таким наближенням. Обертаючи знайдену залежність отримаємо функцію $\mu = \mu(V_g)$, яка зображена на Рис. 4.12. Описана процедура обчислення хімічного потенціалу як функції напруги затвору легко може бути розширена і на вищі рівні Ландау.

Локальну густину станів (local density of states, LDOS) можна обчислити за формулою:

$$\rho(r, E, \mu) = g_s g_v g_l \sum_{n,m} |\Psi_{nm}(r)|^2 \delta_{\Gamma}(E - E_{nm}(\mu)), \qquad (4.30)$$

де енергії підрівнів залежать від хімічного потенціалу через екранований потенціал домішки. В експерименті [12] спектр електронів визначався шляхом вимірювання диференціальної тунельної провідності dI/dV_{bias} у місці розташування щупа електронного мікроскопа як функції напруги зміщення $V_{bias} = (E - E_F)/e$, де E_F – енергія рівня Фермі (при нульовій або близькій до нуля температурі $E_F \approx \mu$, тому надалі нехтуватимемо відмінностями між ними). Далеко від домішки локальна густина станів демонструє практично незміщені рівні Ландау, тому що на великих відстанях $(r \gg l_B)$ внесок дають лише хвильові функції станів з великими значеннями кутового моменту *m*. Енергії цих станів зміщені незначно, тому $E_{nm} \approx E_n^{(0)} = \text{sign}(n)(\hbar v_F/l_B)\sqrt{2|n|}$. До того ж, завдяки аксіальній симетрії потенціалу, поправки до хвильових функцій виникнуть лише у другому порядку теорії збурень, а тому з гарною точністю їх можна замінити незбуреними хвильовими функціями $\Psi_{nm}(r) \approx \Psi_{nm}^{(0)}(r)$. У цьому випадку можна провести сумування за квантовим числом кутового моменту *m* і отримати

$$\rho(r \gg l_B, V_{bias}, \mu) = \frac{g_s g_v g_l}{2\pi l_B^2} \sum_{n=-n_c}^{n_c} \delta_{\Gamma}(eV_{bias} + \mu - E_n^{(0)}).$$
(4.31)

Таким чином, локальна густина станів на великих відстанях є дуже подібною до випадку, коли домішка взагалі відсутня, і єдиний вплив останньої – це асиметрія по хімічному потенціалу завдяки зміщенню рівнів Ландау. Тобто на великих відстанях від домішки ($r \gg l_B$) локальна густина станів демонструє послідовність піків, які відповідають незбуреним рівням Ландау. Як видно з Рис. 4.13, піки розміщуються при напругах зміщення $eV_{bias} = E_n^{(0)} - \mu$. Це узгоджується з експериментальними спостереженнями (див. Рис. 3(а) у роботі [12]).

Щоб врахувати зворотній вплив домішки на поляризаційну фун-



Рис. 4.13. Локальна густина станів на великій відстані від домішки як функція напруг зміщення та затвору.

кцію, підемо наступним шляхом. Знехтуємо впливом домішки на хвильові функції (як зазначалося раніше, поправка до них з'являється лише у другому порядку теорії збурень завдяки аксіальній симетрії потенціалу), таким чином зберігаючи трансляційну симетрію поляризаційної функції. Але будемо враховувати зсув і розщеплення енергетичних рівнів під дією потенціалу домішки.

Коли домішка відсутня, рівні Ландау є виродженими за орбітальним квантовим числом і всі $g_s g_l g_v N \approx 4800$ електронів на кожному з рівнів мають однакову енергію, яка визначається лише номером рівня Ландау – головним квантовим числом *n*. Розглянемо нульовий рівень Ландау. Відповідний внесок від усіх його електронів до поляризаційної функції дорівнює $\delta \Pi_0 = \frac{N_f}{4\pi l_B^2} 2Q_{00}^{++} (\frac{q^2 l_B^2}{2}, 0) \delta_{\Gamma}(\mu)$. Оскільки потенціал домішки розщеплює рівні Ландау, знімаючи виродження за орбітальним квантовим числом *m*, кожен підрівень з фіксованим *m* містить лише 8 електронів. Природно, що внесок кожного з підрівнів має бути в 600 разів меншим за внесок усього рівня Ландау, тому що поляризаційні ефекти пропорційні до кількості електронів, які беруть участь в екрануванні зовнішнього потенціалу. Тому наближення, що дозволить врахувати зміщення та уширення рівнів Ландау за рахунок наявності домішки, – це заміна в першому доданку для n = 0 у формулі (4.22) уширеної дельтафункції $\delta_{\Gamma}(\mu)$ на $\frac{1}{N} \frac{dN}{dE} \Big|_{E=\mu}$, де інтегральна густина станів dN/dE наведена у формулі (4.29). З урахуванням усього сказаного вище, поляризаційна функція набуде вигляду:

$$\Pi^{(0)}(0,q;\mu) = \frac{N_f}{4\pi l_B^2} \Biggl\{ \frac{2Q_{00}^{++}(q^2 l_B^2/2,0)}{m_{max}+1} \sum_{m=0}^{m_{max}} \delta_{\Gamma}(\mu - \delta E_{0m}) + \\ + \sum_{n=1}^{n_c} \sum_{\lambda=\pm} Q_{nn}^{\lambda\lambda} \left(q^2 l_B^2/2,0\right) \delta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n) - \\ - \sum_{\substack{n,n'=0 \ \lambda,\lambda'=\pm\\\lambda n\neq\lambda'n'}}^{n_c} \sum_{\substack{\lambda'=\pm\\\lambda n\neq\lambda'n'}} Q_{nn'}^{\lambda\lambda'} \left(q^2 l_B^2/2,0\right) \frac{\theta_{\Gamma}(\mu - \lambda M_n) - \theta_{\Gamma}(\mu - \lambda' M_{n'})}{\lambda M_n - \lambda' M_{n'}} \Biggr\}.$$
(4.32)

У такий спосіб ми вносимо зміщення та додаткове уширення рівнів Ландау внаслідок кулонівського потенціалу домішки. Аналогічні процедури можна проробити для інших рівнів Ландау, але тут зосередимося лише на нульовому рівні і дослідимо випадок, коли хімічний потенціал проходить через нього. Така заміна робить поляризаційну функцію асиметричною по відношенню до заміни знаку хімічного потенціалу. І це добре видно на графіках локальної густини станів, що наведені на Рис. 4.14.

Послідовність дій для обчислення локальної густини станів наступна. Фіксуємо значення хімічного потенціалу (напруги затвору) і, використовуючи поляризаційну функцію (4.32), обчислюємо за формулою (4.21) екранований потенціал домішки $V_{tot}^{(0)}(\mathbf{x})$. Чисельно інтегруємо рівняння Дірака з цим потенціалом і отримуємо енергії кількох перших



Рис. 4.14. Локальна густина станів поблизу точки розташування домішки для чотирьох значень напруги затвору. Остання панель демонструє локальну густину станів за відсутності екранування.

рівнів Ландау та відповідні хвильові функції. Далі, за формулою (4.30) обчислюємо локальну густину станів, яка зображена на Рис. 4.14. Для порівняння з експериментальними даними обрано такі ж значення напруги затвору, як і в роботі [12]. З графіків чітко видно, що домішка сильно екранується, коли хімічний потенціал знаходиться всередині рівня Ландау (напруги затвору $V_g = -10$ В, -5 В, 0 В), і екранування значно ослаблене, коли хімічний потенціал лежить між рівнями Ландау ($V_g = +7$ В). Також на останній панелі на Рис. 4.14 зображено для порівняння локальну густину станів у випадку, коли поляризаційні ефекти "вимкнені". Бачимо, що розщеплення рівнів є значно більш ефективним у порівнянні з випадком, коли екранування включене до розгляду.

4.5 Висновки до розділу 4

У цьому 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.

Як виявилося, в таких системах явище надкритичного атомного колапсу не може виникати в традиційному розумінні, коли зв'язаний стан електрона у потенціалі зарядженої домішки занурюється до нижнього континууму енергій і перетворюється в резонанс, тому що континууми відсутні. Натомість, виникає інший прояв цього явища, який полягає у перегрупуванні енергетичних рівнів електрона при перевищенні зарядом домішки деякого критичного значення.

Аналіз поведінки хвильових функцій при переході системи через точку максимального зближення енергетичних рівнів показав, що явище можна інтерпретувати практично так, як і раніше. Енергетичні рівні системи можна досить чітко розділити на верхній та нижній "квазіконтинууми" і кілька дискретних рівнів між ними, які при поступовому збільшенні заряду домішки виходять із верхнього квазіконтинууму, зміщуються вниз і, врешті, зливаються з нижнім квазіконтинуумом. Це якісно відповідає поведінці рівнів у класичному варіанті явища. До того ж, у момент, коли дискретний рівень підходить до квазіконтинууму, щоб приєднатися до нього, його електронна густина передається кільком близько лежачим рівням у вигляді гострих піків поблизу початку координат. Це відповідає тому, що утворився резонанс у нижньому континуумі, який збурює хвильові функції континууму в смузі енергій, порядку його ширини. При поступовому збільшенні заряду ці піки з'являються у все більш глибоко лежачих рівнів, що відповідає зміщенню резонансу углиб континууму.

Єдиною відмінністю є те, що зв'язаний стан не перетинає рівнів квазіконтинууму при збільшенні заряду домішок. Такий перетин забороняє теорема Вігнера-фон Неймана, оскільки рівні мають однакові квантові числа кутового моменту, а отже, і однакову симетрію. Але таке неперетинання не заважає обміну електронними густинами між цими станами. Після проходження системою критичного значення заряду рівні квазіконтинууму якісно мають такий же вигляд, незважаючи на те, що до них приєднався ще один рівень. Тобто відбувається зсув нумерації рівнів квазіконтинууму на 1. А електронна густина "зайвого" рівня, як уже було зазначено вище, розподіляється між кількома станами континууму у вигляді гострих піків поблизу початку координат.

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, як виявилося, сильно залежить від положення хімічного потенціалу відносно рівнів Ландау. Коли хімічний потенціал лежить всередині рівня Ландау, екранування є дуже інтенсивним, тому ефективний заряд домішки значно зменшується. На додачу, немонотонна залежність статичної поляризаційної функції від імпульсу з максимумом при q = 0 призводить до осциляцій екранованого потенціалу як функції відстані зі зміною знаку. Тому в деяких областях потенціал домішки навіть стає притягальним, тобто відбувається переекранування. З іншої сторони, коли хімічний потенціал лежить між рівнями Ландау, екранування мінімальне і домішка значно впливає на спектр електронів. Така поведінка нещодавно спостерігалася експериментально в роботах [12,67], які послугували мотивацією для дисертаційного дослідження.

За матеріалами цього розділу опубліковано статтю [18].

ВИСНОВКИ

Дисертація присвячена теоретичному дослідженню властивостей електронних станів у графені з зарядженими домішками. Зокрема, розглядається явище надкритичної нестабільності, умови його виникнення та особливості прояву в системах домішок із зарядами одного та різних знаків. Також досліджується можливість реалізації цього явища у системах, де спектр електронів є виключно дискретним: листі графену обмеженої площі та графені у зовнішньому магнітному полі. Окрім того, вивчається вплив поляризаційних ефектів на екранування потенціалу домішок у графені в магнітному полі. Отже, головні результати дисертаційної роботи полягають у наступному:

- 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- Novoselov, K. S. Electric field effect in atomically thin Carbon films / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov *et al.* // Science. — 2004. — Vol. 306, No. 5696. — P. 666 – 669.
- [2] Katsnelson, M. I. Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene / M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, A. K. Geim // Nat. Phys. — 2006. — Vol. 2, No. 9. — P. 620 – 625.
- [3] Young, A. F. Quantum interference and Klein tunnelling in graphene heterojunctions / A. F. Young, P. Kim // Nat. Phys. — 2009. — Vol. 5, No. 3. — P. 222 – 226.
- [4] Pereira, V. M. Coulomb impurity problem in graphene / V. M. Pereira, J. Nilsson, A. H. Castro Neto // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99, Iss. 16. P. 166802.
- [5] Shytov, A. V. Atomic collapse and quasi-Rydberg states in graphene /
 A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, L. S. Levitov // Phys. Rev. Lett. —
 2007. Vol. 99, Iss. 24. P. 246802.
- [6] Wang, Y. Observing atomic collapse resonances in artificial nuclei on graphene / Y. Wang, D. Wong, A. V. Shytov et al. // Science. 2013. Vol. 340, No. 6133. P. 734 737.
- [7] Pomeranchuk, I. Ya. On energy levels in systems with Z > 137 /
 I. Ya. Pomeranchuk, Ya. A. Smorodinsky // J. Phys. USSR. —
 1945. Vol. 9. P. 97 101.
- [8] Gamayun, O. V. Supercritical Coulomb center and excitonic instabil-

ity in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // *Phys. Rev. B.* — 2009. — Vol. 80, Iss. 16. — P. 165429.

- [9] De Martino, A. Electric-dipole-induced universality for Dirac fermions in graphene / A. De Martino, D. Klöpfer, D. Matrasulov, R. Egger // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Vol. 112, Iss. 18. — P. 186603.
- [10] Klöpfer, D. Scattering theory and ground-state energy of Dirac fermions in graphene with two Coulomb impurities / D. Klöpfer, A. De Martino, D. Matrasulov, R. Egger // Eur. Phys. J. B. 2014. Vol. 87, No. 8. P. 187.
- [11] Greiner, W. Quantum Electrodynamics of Strong Fields. With an Introduction into Modern Relativistic Quantum Mechanics / W. Greiner, B. Müller, J. Rafelski. Texts and Monographs in Physics. — Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1985. — 596 p.
- [12] Luican-Mayer, A. Screening charged impurities and lifting the orbital degeneracy in graphene by populating Landau levels / A. Luican-Mayer, M. Kharitonov, G. Li et al. // Phys. Rev. Lett. — 2014. — Vol. 112, Iss. 3. — P. 036804.
- [13] Pyatkovskiy, P. K. Dynamical polarization of graphene in a magnetic field / P. K. Pyatkovskiy, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83, Iss. 7. P. 075422.
- [14] 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.
- [15] 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.

- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] Sobol, O. O. 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.
- [19] Соболь, О. О. Дослідження нестабільності діраківського вакууму в задачі двох кулонівських центрів в графені / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя"(15 – 16 травня 2013 року). Тези доповідей. — Київ, 2013. — С. 59.
- [20] Соболь, О. О. Надкритична нестабільність у графені з двома зарядженими домішками / О. О. Соболь, Е. В. Горбар // Тези доповідей наукової конференції молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики". — Київ, 2014. — С. 78 – 79.
- [21] Sobol, O. O. Supercritical instability in graphene with two charged impurities / O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // The International Summer School "Nanotechnology: From Fundamental Re-

search to Innovations" and International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014). Book of abstracts / Ed. by O. Fesenko. — L'viv: Eurosvit, 2014. — P. 278.

- [22] Соболь, О. О. Надкритична нестабільність у графені, індукована полем електричного диполя / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Тези доповідей наукової конференції "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики"(12–15 травня 2015 року). — Київ, 2015. — С. 4–5.
- [23] Wallace, P. R. The band theory of graphite / P. R. Wallace // Phys.
 Rev. 1947. Vol. 71, Iss. 9. P. 622 634.
- [24] Semenoff, G. W. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly / G. W. Semenoff // Phys. Rev. Lett. — 1984. — Vol. 53, Iss. 26. — P. 2449 – 2452.
- [25] Горбар, Е. В. Основи фізики графену. Навчальний посібник /
 Е. В. Горбар, С. Г. Шарапов. Київ: Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова, 2013. — 118 с.
- [26] Gusynin, V. P. AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics / V. P. Gusynin, S. G. Sharapov, J. P. Carbotte // Int. J. Mod. Phys. B. 2007. Vol. 21, No. 27. P. 4611 4658.
- [27] Geim, A. K. The rise of graphene / A. K. Geim, K. S. Novoselov //
 Nat. Mater. 2007. Vol. 6, No. 3. P. 183 191.
- [28] Castro Neto, A. H. The electronic properties of graphene / A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al. // Rev. Mod. Phys. — 2009. — Vol. 81, Iss. 1. — P. 109 – 162.

- [29] Abergel, D. S. L. Properties of graphene: a theoretical perspective /
 D. S. L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich et al. // Adv. Phys. —
 2010. Vol. 59, No. 4. P. 261 482.
- [30] Das Sarma, S. Electronic transport in two-dimensional graphene /
 S. Das Sarma, S. Adam, E. H. Hwang, E. Rossi // Rev. Mod. Phys. —
 2011. Vol. 83, Iss. 2. P. 407 470.
- [31] Chakraborty, T. Graphene: a nanoscale quantum playing field /
 T. Chakraborty // Phys. Canada. 2006. Vol. 63. P. 351 354.
- [32] Ponomarenko, L. A. Cloning of Dirac fermions in graphene superlattices / L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu et al. // Nature. — 2013. — Vol. 497, No. 7451. — P. 594 – 597.
- [33] Song, J. C. W. Electron interactions and gap opening in graphene superlattices / J. C. W. Song, A. V. Shytov, L. S. Levitov // Phys. Rev. Lett. 2013. Vol. 111, Iss. 26. P. 266801.
- [34] Giovannetti, G. Substrate-induced band gap in graphene on hexagonal boron nitride: Ab initio density functional calculations / G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks et al. // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76, Iss. 7. P. 073103.
- [35] Gusynin, V. P. Catalysis of dynamical flavor symmetry breaking by a magnetic field in 2 + 1 dimensions / V. P. Gusynin, V. A. Miransky, I. A. Shovkovy // Phys. Rev. Lett. 1994. Vol. 73, Iss. 26. P. 3499 3502.
- [36] Dirac, P. A. M. The quantum theory of the electron /
 P. A. M. Dirac // Proc. Royal Soc. A. 1928. Vol. 117,
 No. 778. P. 610 624.

- [37] Dirac, P. A. M. The quantum theory of the electron. Part II /
 P. A. M. Dirac // Proc. Royal Soc. A. 1928. Vol. 118,
 No. 779. P. 351 361.
- [38] Darwin, C. G. The wave equations of the electron / C. G. Darwin //
 Proc. Royal Soc. A. 1928. Vol. 118, No. 780. P. 654 680.
- [39] Gordon, W. Die Energieniveaus des Wasserstoffatoms nach der Diracschen Quantentheorie des Elektrons / W. Gordon // Z. Phys. — 1928. — Vol. 48. — P. 11 – 14.
- [40] Ландау, Л. Д. Курс теоретической физики. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — 6-е, исправленное изд. — Москва: Физматлит, 2004. — 800 с.
- [41] Зельдович, Я. Б. Электронная структура сверхтяжелых атомов /
 Я. Б. Зельдович, В. С. Попов // Успехи Физических Наук. 1971. —
 Т. 105, № 3. С. 403 440.
- [42] Gershtein, S. S. Positron production during the mutual approach of heavy nuclei and the polarization of the vacuum / S. S. Gershtein, Ya. B. Zeldovich // Sov. Phys. JETP. — 1970. — Vol. 30, No. 2. — P. 358 – 361.
- [43] Rafelski, J. Superheavy elements and an upper limit to the electric field strength / J. Rafelski, L. P. Fulcher, W. Greiner // Phys. Rev. Lett. — 1971. — Vol. 27, Iss. 14. — P. 958 – 961.
- [44] Müller, B. Solution of the Dirac equation for strong external fields /
 B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski, W. Greiner // Phys. Rev. Lett. —
 1972. Vol. 28, Iss. 19. P. 1235 1238.

- [45] Marinov, M. S. Critical distance in collision of heavy ions / M. S. Marinov, V. S. Popov // Sov. Phys. JETP. 1975. Vol. 41, No. 2. P. 205 209.
- [46] Shytov, A. V. Vacuum polarization and screening of supercritical impurities in graphene / A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, L. S. Levitov // Phys. Rev. Lett. 2007. Vol. 99, Iss. 23. P. 236801.
- [47] Fogler, M. M. Screening of a hypercritical charge in graphene / M. M. Fogler, D. S. Novikov, B. I. Shklovskii // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 76, Iss. 23. — P. 233402.
- [48] Wang, J. Critical behavior in graphene with Coulomb interactions /
 J. Wang, H. A. Fertig, G. Murthy // Phys. Rev. Lett. 2010. —
 Vol. 104, Iss. 18. P. 186401.
- [49] Sabio, J. Two-body problem in graphene / J. Sabio, F. Sols,
 F. Guinea // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 81, Iss. 4. P. 045428.
- [50] Khveshchenko, D. V. Ghost excitonic insulator transition in layered graphite / D. V. Khveshchenko // Phys. Rev. Lett. — 2001. — Vol. 87, Iss. 24. — P. 246802.
- [51] Gorbar, E. V. Magnetic field driven metal-insulator phase transition in planar systems / E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, I. A. Shovkovy // Phys. Rev. B. — 2002. — Vol. 66, Iss. 4. — P. 045108.
- [52] Gorbar, E. V. Fractal structure of the effective action in (quasi)planar models with long-range interactions / E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky, I. A. Shovkovy // Phys. Lett. A. 2003. Vol. 313, No. 5–6. P. 472–477.

- [53] Khveshchenko, D. V. Excitonic instability in layered degenerate semimetals / D. V. Khveshchenko, H. Leal // Nucl. Phys. B. — 2004. — Vol. 687, No. 3. — P. 323 – 331.
- [54] Gamayun, O. V. Gap generation and semimetal-insulator phase transition in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. — 2010. — Vol. 81, Iss. 7. — P. 075429.
- [55] González, J. Electron self-energy effects on chiral symmetry breaking in graphene / J. González // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85, Iss. 8. — P. 085420.
- [56] Drut, J. E. Critical exponents of the semimetal-insulator transition in graphene: A Monte Carlo study / J. E. Drut, T. A. Lähde // Phys. Rev. B. 2009. Vol. 79, Iss. 24. P. 241405.
- [57] Saffarzadeh, A. Coulomb bound states and resonances due to groups of Ca dimers adsorbed on suspended graphene / A. Saffarzadeh, G. Kirczenow // Phys. Rev. B. — 2014. — Vol. 90, Iss. 15. — P. 155404.
- [58] Matveev, V. I. Dirac electron in the electric dipole field / V. I. Matveev, M. M. Musakhanov, D. U. Matrasulov // ArXiv eprints: High Energy Physics – Theory. — 1995. — arXiv: hepth/9501027.
- [59] Matrasulov, D. U. Eigenvalue problem for the relativistic electric-dipole system / D. U. Matrasulov, V. I. Matveev, M. M. Musakhanov // Phys. Rev. A. 1999. Vol. 60, Iss. 5. P. 4140 4143.
- [60] Efimov, V. Energy levels arising from resonant two-body forces in a

three-body system / V. Efimov // Phys. Lett. B. — 1970. — Vol. 33, No. 8. — P. 563 – 564.

- [61] Braaten, E. Universality in few-body systems with large scattering length / E. Braaten, H.-W. Hammer // Phys. Rep. 2006. Vol. 428, No. 5 6. P. 259 390.
- [62] von Neumann, J. Uber das Verhalten von Eigenwerten bei adiabatischen Prozessen. (On the behavior of eigenvalues in the adiabatic processes.) / J. von Neumann, E. P. Wigner // Phys. Z. — 1929. — Vol. 30. — P. 467 – 470.
- [63] Tsui, D. C. Two-dimensional magnetotransport in the extreme quantum limit / D. C. Tsui, H. L. Stormer, A. C. Gossard // Phys. Rev. Lett. — 1982. — Vol. 48, Iss. 22. — P. 1559 – 1562.
- [64] Gamayun, O. V. Magnetic field driven instability of a charged center in graphene / O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // Phys. Rev. B. — 2011. — Vol. 83, Iss. 23. — P. 235104.
- [65] Zhang, Y. Coulomb impurity under magnetic field in graphene: A semiclassical approach / Y. Zhang, Y. Barlas, K. Yang // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85, Iss. 16. — P. 165423.
- [66] Kim, S. C. Coulomb impurity problem of graphene in magnetic fields /
 S. C. Kim, S. R. E. Yang // Ann. Phys. 2014. Vol. 347. —
 P. 21 31.
- [67] Mao, J. Realization of a tunable artificial atom at a supercritically charged vacancy in graphene / J. Mao, Y. Jiang, D. Moldovan *et al.* // Nat. Phys. — 2016. — Vol. 12, No. 6. — P. 545 – 549.

- [68] Sun, S. Impurity spectra of graphene under electric and magnetic fields / S. Sun, J.-L. Zhu // Phys. Rev. B. 2014. Vol. 89, Iss. 15. P. 155403.
- [69] Zhu, J.-L. Magnetic restrictions of atomic collapse in gapped graphene / J.-L. Zhu, C. Liu, N. Yang // Phys. Rev. B. — 2014. — Vol. 90, Iss. 12. — P. 125405.
- [70] Slizovskiy, S. Bound states of charges on top of graphene in a magnetic field / S. Slizovskiy // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92, Iss. 19. P. 195426.
- [71] Pereira, V. M. Supercritical Coulomb impurities in gapped graphene /
 V. M. Pereira, V. N. Kotov, A. H. Castro Neto // Phys. Rev. B. —
 2008. Vol. 78, Iss. 8. P. 085101.
- [72] Бэйтмен, Г. Высшие трансцендентные функции. В 3 т. Т. 2. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены / Г. Бэйтмен, А. Эрдейи. — Москва: Наука, 1974. — 296 с.
- [73] Popov, V. S. Critical charge in quantum electrodynamics /
 V. S. Popov // Phys. At. Nucl. 2001. Vol. 64, No. 3. —
 P. 367 392.
- [74] Marinov, M. S. Variational approach to the relativistic two-center problem: Critical internuclear distance / M. S. Marinov, V. S. Popov, V. S. Stolin // J. Comput. Phys. 1975. Vol. 19, No. 3. P. 241 256.
- [75] Popov, V. S. WKB method at Z > 137 and its applications to the theory of supercritical atoms / V. S. Popov, D. N. Voskresenskii,
V. L. Eletskii, V. D. Mur // Sov. Phys. JETP. — 1979. — Vol. 49,
No. 2. — P. 218 - 231.

- [76] Müller, B. Electron shells in over-critical external fields / B. Müller,
 J. Rafelski, W. Greiner // Z. Phys. 1972. Vol. 257, No. 1. —
 P. 62 77.
- [77] Soff, G. Shakeoff of the vacuum polarization in quasimolecular collisions of very heavy ions / G. Soff, J. Reinhardt, B. Müller, W. Greiner // Phys. Rev. Lett. 1977. Vol. 38, Iss. 11. P. 592 595.
- [78] Langer, R. E. On the connection formulas and the solutions of the wave equation / R. E. Langer // Phys. Rev. 1937. Vol. 51, Iss. 8. P. 669 676.
- [79] Hwang, E. H. Dielectric function, screening, and plasmons in twodimensional graphene / E. H. Hwang, S. Das Sarma // Phys. Rev. B. — 2007. — Vol. 75, Iss. 20. — P. 205418.
- [80] Mayorov, A. S. How close can one approach the Dirac point in graphene experimentally? / A. S. Mayorov, D. C. Elias, I. S. Mukhin et al. // Nano Lett. — 2012. — Vol. 12, No. 9. — P. 4629 – 4634.
- [81] Cohen-Tannoudji, C. Quantum Mechanics / C. Cohen-Tannoudji,
 B. Diu, F. Laloe. Paris: Hermann, 1977. Vol. 2. 450 p.
- [82] Vasak, D. Fission of bags by spontaneous quark-antiquark pair production in supercritical colour fields / D. Vasak, K. H. Wietschorke, B. Müller, W. Greiner // Z. Phys. C. 1983. Vol. 21, No. 1. P. 119 125.

- [83] Kovner, A. Kosterlitz-Thouless mechanism of two-dimensional superconductivity / A. Kovner, B. Rosenstein // Phys. Rev. B. — 1990. — Vol. 42, Iss. 7. — P. 4748 – 4751.
- [84] Dorey, N. QED₃ and two-dimensional superconductivity without parity violation / N. Dorey, N. E. Mavromatos // Nucl. Phys. B. — 1992. — Vol. 386, No. 3. — P. 614 – 680.
- [85] Marino, E. C. Quantum electrodynamics of particles on a plane and the Chern-Simons theory / E. C. Marino // Nucl. Phys. B. — 1993. — Vol. 408, No. 3. — P. 551 – 564.
- [86] Gorbar, E. V. Dynamical chiral symmetry breaking on a brane in reduced QED / E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, V. A. Miransky // Phys. Rev. D. — 2001. — Vol. 64, Iss. 10. — P. 105028.
- [87] Latil, S. Charge carriers in few-layer graphene films / S. Latil, L. Henrard // Phys. Rev. Lett. — 2006. — Vol. 97, Iss. 3. — P. 036803.
- [88] Novoselov, K. S. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov et al. // Nature. — 2005. — Vol. 438, No. 7065. — P. 197 – 200.
- [89] Градштейн, И. С. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений / И. С. Градштейн, И. М. Рыжик. — Москва: Физматгиз, 1963. — 1100 с.
- [90] Byrd, P. F. Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Scientists / P. F. Byrd, M. D. Friedman. — 2nd, revised edition. — New York: Springer-Verlag, 1971. — 358 p.
- [91] Prudnikov, A.P. Integrals and Series: Direct Laplace Transforms /

A.P. Prudnikov, Yu.A. Brychkov, O.I. Marichev. — New York: Gordon and Breach Science Publishers, 1992. — Vol. 4. — 619 p.

[92] Luke, Y. L. The Special Functions and Their Approximations /
Y. L. Luke. — New York: Academic Press, 1969. — Vol. 1. —
350 p.

Додатки

Додаток А Розв'язок рівняння Дірака для одновимірної прямокутної потенціальної ями

У цьому додатку проводяться обчислення енергетичного спектру та хвильових функцій діраківського електрона в одновимірній прямокутній потенціальній ямі. Ці результати є корисними при аналізі поведінки спектру і хвильових функцій електрона в дипольному прямокутному потенціалі, який розглядається в пункті 3.2.2 розділу 3 даної дисертації.

Розглянемо одновимірну задачу з прямокутною потенціальною ямою:

$$v(x) = \begin{cases} 0, & \text{якщо } x < -d; \\ -v_0, & \text{якщо } -d \le x < d; \\ 0, & \text{якщо } x \ge d. \end{cases}$$
(A.1)

Обезрозмірене рівняння Дірака має вигляд (3.8). Виключимо нижню компоненту $\chi = i\partial_x \phi/(v - \varepsilon - 1)$, тоді отримаємо рівняння:

$$\phi'' - \frac{v'}{v - \varepsilon - 1}\phi' + \left((v - \varepsilon)^2 - 1\right)\phi = 0.$$
(A.2)

Оскільки шукатимемо зв'язані стани, то енергія набуває значень: $-1 \le \varepsilon \le 1$. Похідна від потенціалу має вигляд:

$$v'(x) = v_0 \left(-\delta(x+d) + \delta(x-d) \right),$$
 (A.3)

тому другий доданок в рівнянні (А.2) рівний нулю скрізь, окрім двох точок, де потенціал міняється стрибком.

Розв'яжемо рівняння (А.2) в кожній з 3 областей, де потенціал є сталим за величиною і "зшиємо" розв'язки в точках розриву потенціалу, використовуючи умови неперервності кожної з компонент спінора.

1) x < -d

$$\phi_I(x) = C_1 e^{\kappa_0 x},$$

$$\chi_I(x) = -iC_1 \frac{\kappa_0}{\varepsilon + 1} e^{\kappa_0 x};$$
(A.4)

2) -d < x < d

$$\phi_{II}(x) = C_2 \sin(k_1 x) + C_3 \cos(k_1 x),$$

$$\chi_{II}(x) = -i \frac{k_1}{v_0 + \varepsilon + 1} \left(C_2 \cos(k_1 x) - C_3 \sin(k_1 x) \right); \quad (A.5)$$

3) x > d

$$\phi_{III}(x) = C_4 e^{-\kappa_0 x},$$

$$\chi_{III}(x) = i C_4 \frac{\kappa_0}{\varepsilon + 1} e^{-\kappa_0 x}.$$
(A.6)

Тут введено позначення: $\kappa_0 = \sqrt{1 - \varepsilon^2}, \ k_1 = \sqrt{(v_0 + \varepsilon)^2 - 1}.$

Після зшивки отримаємо систему рівнянь на коефіцієнти C_i :

$$\hat{A}\vec{C} = \vec{0},\tag{A.7}$$

де головна матриця системи має вигляд:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} e^{-d\kappa_0} & \sin(dk_1) & -\cos(dk_1) & 0\\ \frac{e^{-d\kappa_0}\kappa_0}{1+\varepsilon} & -\frac{\cos(dk_1)k_1}{1+V+\varepsilon} & -\frac{\sin(dk_1)k_1}{1+V+\varepsilon} & 0\\ 0 & \sin(dk_1) & \cos(dk_1) & -e^{-d\kappa_0}\\ 0 & \frac{\cos(dk_1)k_1}{1+V+\varepsilon} & -\frac{\sin(dk_1)k_1}{1+V+\varepsilon} & \frac{e^{-d\kappa_0}\kappa_0}{1+\varepsilon} \end{pmatrix}.$$
 (A.8)

Спектр задачі можна знайти із секулярного рівняння

$$\det \hat{A} = 0, \tag{A.9}$$

яке переписується в такій формі:

$$\operatorname{tg}\left(2d\sqrt{(v_0+\varepsilon)^2-1}\right) = \frac{\sqrt{1-\varepsilon^2}\sqrt{(v_0+\varepsilon)^2-1}}{\varepsilon(v_0+\varepsilon)-1}.$$
 (A.10)

Чисельні розв'язки секулярного рівняння (А.10) наведені на Рис. А.1.



Рис. А.1. Залежність енергії зв'язаних станів у потенціальній ямі/бар'єрі від сили потенціалу $|v_0|$ при фіксованому значенні півширини ями d = 0.25: сині суцільні криві відповідають потенціальній ямі $(v_0 > 0)$, а червоні штрихові криві – бар'єру $(v_0 < 0)$.

Додаток Б Математичний додаток

У цьому додатку для довідки наводяться деякі відомості про спеціальні функції, а також обчислюються інтеграли, які виникають у проміжних обчисленнях у розділах 2 та 3 даної дисертації.

Б.1 Інтеграли

1. Аналітичні вирази для матриць-коефіцієнтів (2.35) – (2.37) можуть бути отримані шляхом інтегрування за змінною ν з використанням інтегралів (3.131.5), (3.141.10), (3.141.16), (3.141.22), (3.147.6), (3.151.6), (3.167.6), (3.167.14), (3.167.22) та (3.169.11), наведених в [89], які виражаються через повні еліптичні інтеграли першого K(k), другого E(k)та третього роду $\Pi(k,l)$. До остаточного вигляду їх можна привести за допомогою тотожностей [90]:

$$\Pi(\mu,\mu) = \frac{\pi}{4(1-\mu)} + \frac{1}{2}K(\mu), \tag{B.1}$$

$$\Pi(\mu^2,\mu) = \frac{1}{1-\mu^2} E(\mu).$$
(B.2)

2. При обрахунку кулонівського інтеграла (3.41) в методі ЛКАО виникає наступний вираз:

$$\int_{0}^{\pi} \frac{d\theta}{\sqrt{R^{2} + r^{2} + r_{0}^{2} - 2Rr\cos\theta}} = \left|\cos\theta = 2\sin^{2}\frac{\pi - \theta}{2} - 1, \ \frac{\pi - \theta}{2} = x\right| = \\ = \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \frac{2\,dx}{\sqrt{(R+r)^{2} + r_{0}^{2} - 4Rr\sin^{2}x}} = \frac{2}{\sqrt{(R+r)^{2} + r_{0}^{2}}} \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{\sqrt{1 - k^{2}\sin^{2}x}} = \\ = \frac{2}{\sqrt{(R+r)^{2} + r_{0}^{2}}} K(k), \ \text{ge} \ k^{2} = \frac{4Rr}{(R+r)^{2} + r_{0}^{2}}.$$
(B.3)

Тут враховано означення повного еліптичного інтеграла І роду в лежан-

дровій нормальній формі (див. формули 8.110, 8.111 в книзі [89]):

$$\mathbf{K}(k) = \int_{0}^{1} \frac{dt}{\sqrt{(1-t^2)(1-k^2t^2)}} = \int_{0}^{\frac{\pi}{2}} \frac{dx}{\sqrt{1-k^2\sin^2 x}}, \ |k| < 1.$$
(B.4)

3. При обрахунку функцій-коефіцієнтів (3.53), (3.54) у варіаційному методі Гальоркіна-Канторовича виникають наступні інтеграли:

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha\sqrt{\tilde{x}^{2}+y^{2}}} y^{2s} \frac{dy}{\sqrt{\tilde{x}^{2}+y^{2}}} = |y=\tilde{x}\operatorname{sh}t| = \tilde{x}^{2s} \int_{0}^{\infty} e^{-z\operatorname{ch}t} \operatorname{sh}^{2s}t \, dt =$$
$$= \tilde{x}^{2s} \frac{\Gamma(s+1/2)}{\Gamma(1/2)} \left(\frac{2}{z}\right)^{s} K_{s}(z) = \frac{\tilde{x}^{2s}(2s-1)!!}{z^{s}} K_{s}(z), \quad z=\alpha\tilde{x}, \quad (B.5)$$

$$\int_{0}^{+\infty} e^{-\alpha \sqrt{\tilde{x}^{2} + y^{2}}} y^{2s} dy = |y = \tilde{x} \operatorname{sh} t| = \tilde{x}^{2s+1} \int_{0}^{\infty} e^{-z \operatorname{ch} t} \operatorname{sh}^{2s} t \operatorname{ch} t dt =$$
$$= -\tilde{x}^{2s+1} \frac{\partial}{\partial z} \int_{0}^{\infty} e^{-z \operatorname{ch} t} \operatorname{sh}^{2s} t dt = -\tilde{x}^{2s+1} \frac{\Gamma(s+1/2)}{\Gamma(1/2)} \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{2}{z}\right)^{s} K_{s}(z) \right] =$$
$$= \frac{\tilde{x}^{2s+1}(2s-1)!!}{z^{s}} K_{s+1}(z), \quad z = \alpha \tilde{x}. \quad (B.6)$$

Тут враховано інтегральне представлення функції Макдональда (див. формулу 8.432.2 в книзі [89]):

$$K_{\nu}(z) = \frac{\left(\frac{z}{2}\right)^{\nu} \Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)} \int_{0}^{+\infty} e^{-z \operatorname{cht}} \operatorname{sh}^{2\nu} t \, dt, \quad \Re e \, \nu > -\frac{1}{2}, \quad \Re e \, z > 0, \qquad (B.7)$$

а також загальну властивість всіх циліндричних функцій (див. формулу

8.472.4 в книзі [89]):

$$\left(\frac{1}{z}\frac{d}{dz}\right)^m \left(z^{-\nu} Z_{\nu}(z)\right) = (-1)^m z^{-\nu-m} Z_{\nu+m}(z).$$
(B.8)

4. При обрахунку функцій-коефіцієнтів (3.55) у варіаційному методі Гальоркіна-Канторовича виникає ряд, де фігурують інтеграли $I_{s,n}(z)$, див. (3.57). Якщо застосувати формулу 2.1.4.15 з книги [91], де покласти значення параметрів $\mu = -2n$, a = 1, $\nu = s - 1/2$, то отримаємо вираз:

$$I_{s,n}(z) = \int_{1}^{+\infty} e^{-zr} (r^2 - 1)^{s-1/2} \frac{dr}{r^{2n}} = \frac{1}{2} B\left(s + \frac{1}{2}, n - s\right) {}_{1}F_2\left(\frac{1}{2} - n; \frac{1}{2}, 1 - n + s; \frac{z^2}{4}\right) - \frac{z}{2} B\left(s + \frac{1}{2}, n - s - \frac{1}{2}\right) {}_{1}F_2\left(1 - n; \frac{3}{2}, \frac{3}{2} - n + s; \frac{z^2}{4}\right) + (2z)^{2n-2s} \Gamma\left(2s - 2n\right) {}_{1}F_2\left(\frac{1}{2} - s; 1 - s + n, n - s + \frac{1}{2}; \frac{z^2}{4}\right),$$
(B.9)

але оскільки числа n, s є цілими невід'ємними, то в аргументах ейлерових інтегралів і гіпергеометричної функції можуть стояти від'ємні цілі числа, що ускладнює застосування цієї формули на практиці. Тому застосуємо формулу 2.1.4.20 з книги [91], де покладемо значення параметрів $\mu = -2n, l = 2, k = 1, a = 1, \nu = s - 1/2$:

$$I_{s,n}(z) = \frac{\Gamma(s+1/2)z^{2n-1}}{\sqrt{2\pi} \, 2^{2n-1/2}} G_{31}^{03} \left(\frac{4}{z^2} \left| \begin{array}{c} n, \, n+\frac{1}{2}, \, s+\frac{1}{2} \\ 0 \end{array} \right) \right). \tag{B.10}$$

Ця формула не має ніяких невизначеностей при цілих n, s, а тому зручніша для практичних застосувань. За допомогою співвідношень симетрії для *G*-функції Мейєра, що наведені в Додатку Б.2, її можна звести до найбільш компактної форми (3.57).

Б.2 С-функція Мейєра

G-функція Мейєра — спеціальна функція, що означена наступним чином:

$$G_{p,q}^{m,n}\left(z \middle| \begin{array}{c} \{a_p\}\\ \{b_q\} \end{array}\right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{\prod_{j=1}^m \Gamma(b_j - s) \prod_{j=1}^n \Gamma(1 - a_j + s)}{\prod_{j=m+1}^q \Gamma(1 - b_j + s) \prod_{j=n+1}^p \Gamma(a_j - s)} z^s \, ds,$$
(B.11)

де індекси задовольняють співвідношенням $0 \le m \le q$ та $0 \le n \le p$, а контур γ — петля, що починається і закінчується в $+\infty$, яка охоплює всі полюси $\Gamma(b_j - s), j = \overline{1, m}$ і не охоплює жодного полюса $\Gamma(1 - a_k + s),$ $k = \overline{1, n}$. Тобто, жодне з чисел $(a_k - b_j)$ не є додатним цілим. Це означення, як і всі подальші властивості G-функції Мейєра, наведені в розділі V книги [92]. Там же можна знайти вирази для G-функції Мейєра через узагальнені гіпергеометричні функції, які тут не наводяться.

Корисними для практичного використання виявляються співвідношення симетрії:

$$G_{p,q}^{m,n}\left(z \middle| \begin{array}{c} \{a_p\}\\ \{b_q\} \end{array}\right) = G_{q,p}^{n,m}\left(\frac{1}{z} \middle| \begin{array}{c} \{1-b_q\}\\ \{1-a_p\} \end{array}\right), \quad \arg\frac{1}{z} = -\arg z, \quad (B.12)$$

$$z^{\sigma}G_{p,q}^{m,n}\left(z \middle| \begin{array}{c} \{a_p\}\\ \{b_q\} \end{array}\right) = G_{p,q}^{m,n}\left(z \middle| \begin{array}{c} \{a_p+\sigma\}\\ \{b_q+\sigma\} \end{array}\right), \quad (B.13)$$

$$G_{p,q}^{m,n}\left(z \left|\begin{array}{c}a_{1}, \dots, a_{p}\\b_{1}, \dots, b_{q-1}, a_{1}\end{array}\right) = G_{p-1,q-1}^{m,n-1}\left(z \left|\begin{array}{c}a_{2}, \dots, a_{p}\\b_{1}, \dots, b_{q-1}\end{array}\right), \ n, p, q \ge 1,$$
(B.14)

$$G_{p,q}^{m,n}\left(z \middle| \begin{array}{c}a_1, \dots, a_{p-1}, b_1\\b_1, \dots, b_q\end{array}\right) = G_{p-1,q-1}^{m-1,n}\left(z \middle| \begin{array}{c}a_1, \dots, a_{p-1}\\b_2, \dots, b_q\end{array}\right), \ m, p, q \ge 1.$$
(B.15)

Додаток В Список публікацій за темою дисертації та відомості про апробацію результатів дисертації

В.1 Список публікацій

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Sobol, O. O. 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.
- Соболь, О. О. Дослідження нестабільності діраківського вакууму в задачі двох кулонівських центрів в графені / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя" (15–16 травня 2013 року). Тези доповідей. – Київ, 2013. – С. 59.

- Соболь, О. О. Надкритична нестабільність у графені з двома зарядженими домішками / О. О. Соболь, Е. В. Горбар // Тези доповідей наукової конференції молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики". – Київ, 2014. – С. 78–79.
- Sobol, O. O. Supercritical instability in graphene with two charged impurities / O. O. Sobol, E. V. Gorbar, V. P. Gusynin // The International Summer School "Nanotechnology: From Fundamental Research to Innovations" and International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014). Book of abstracts / Ed. by O. Fesenko. – L'viv: Eurosvit, 2014. – P. 278.
- Соболь, О. О. Надкритична нестабільність у графені, індукована полем електричного диполя / О. О. Соболь, Е. В. Горбар, В. П. Гусинін // Тези доповідей наукової конференції "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики" (12–15 травня 2015 року). – Київ, 2015. – С. 4–5.

В.2 Апробація результатів дисертації

- Семінар відділу теорії нелінійних процесів у конденсованих середовищах і відділу астрофізики та елементарних частинок Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова Національної академії наук України, 15 травня 2017 року, Київ, Україна – усна доповідь.
- Conference on Interactions and Topology in Dirac Systems, 3–9 серпня 2016 року, Трієст, Італія – усна і стендова доповіді.
- School and Workshop on Strongly Correlated Electronic Systems "Novel Materials and Novel Theories", 10–21 серпня 2015 року, Трієст, Італія – стендова доповідь.

- Наукова конференція "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики", 12–15 травня 2015 року, Київ, Україна – усна доповідь.
- 2nd International Research and Practice Conference "Nanotechnology and Nanomaterials" (NANO-2014), 27–30 серпня 2014 року, Львів, Україна – стендова доповідь.
- Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя: сучасні проблеми фізики", 13– 15 травня 2014 року, Київ Україна – стендова доповідь.
- Наукова конференція молодих вчених фізичного факультету до Днів Науки "Наука XXI сторіччя", 15–16 травня 2013 року, Київ, Україна – усна доповідь.