Письма в ЖЭТФ, том 101, вып. 4, с. 282 – 288 © 2015 г. 25 февраля

О кулоновской задаче в графене со щелью в электронном спектре

В. М. Кулешов, В. Д. Мур, Н. Б. Нарожный[1)], А. М. Федотов, Ю. Е. Лозовик[+ 1)]

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия

[+]Институт спектроскопии РАН, 142190 Троицк, Россия

Поступила в редакцию 27 октября 2014 г.

После переработки 25 декабря 2014 г.

Рассмотрены свойства носителей заряда в графене на подложке SiC, допированном примесью с зарядом Z. Для модифицированного на малых расстояниях кулоновского потенциала получены замкнутые аналитические уравнения, определяющие спектр носителей. Определены критические значения заряда Z_{cr}, при которых уровень с данными квантовыми числами достигает границы валентной зоны. При $Z < Z_{cr}$ для низших значений орбитального момента получена зависимость положения уровня энергии связанного состояния от заряда Z. При $Z > Z_{cr}$ вычислены положение и ширина низшего квазистационарного состояния, а также изучен вопрос об экранировке заряда примеси.

DOI: 10.7868/S0370274X15040104

В зависимости от подложки электронные свойства графена описываются эффективным бесщелевым или, напротив, со щелью (массивные фермионы) двумерным уравнением Дирака [1–19]. В присутствии многозарядной примеси особый интерес представляет второй случай [2–6, 11, 12], когда спектр энергий двухмерной гетероструктуры полностью аналогичен спектру трехмерной кулоновской задачи, в том числе с зарядом ядра $Z > 137$ (см., например, [20, 21]). Экранировка заряда кулоновской примеси в графене со щелью рассматривается в работах [5, 7–11], причем в последней из них обсуждается экранировка электронами, рождаемыми вместе с дырками из дираковского моря (по аналогии с трехмерным случаем). Цель настоящей заметки – показать, что указанный механизм экранировки не может реализоваться.

Согласно работам [4, 11] электронные свойства графена на подложке SiC, допированного атомными ядрами или ионами с зарядом Z, могут быть описаны двумерным эффективным уравнением Дирака:

$$\hbar v_{\rm F}\left(-i\boldsymbol{\sigma}\frac{\partial}{\partial\mathbf{x}}-\frac{q}{|\mathbf{x}|}+\frac{m_*v_{\rm F}}{\hbar}\sigma_z\right)\psi_E(\mathbf{x})=E\psi_E(\mathbf{x}). \quad (1)$$

Здесь v_F – скорость на поверхности Ферми, $\mathbf{x} = (x_1, x_2)$, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули, $q = Z\alpha_{\rm F}$, $\alpha_{\rm F} = e^2/\hbar v_{\rm F}$ – "постоянная тонкой структуры" в графене, $\psi_E(\mathbf{x})$ – двухкомпонентная волновая функция электрона с эффективной массой m_*, а E — его энергия.

Для указанных в [4, 11] значений ширины щели $\Delta = 2m_*v_{\rm F}^2 = 0.26$ эВ, эффективной константы связи $\alpha_{\rm F} = 0.4$ и расстояния между ядрами углерода $a_{\rm CC} = 1.42$ Å имеем

$$v_{\rm F} = 5.53\cdot10^8\ \text{см/с},\quad m_* = 7.65\cdot10^{-4}\,m_e, \quad (2)$$

где m_e – масса электрона. При этом "комптоновская длина" в графене $l_{\rm F} = \hbar/m_*v_{\rm F} = 271$ Å.

В силу аксиальной симметрии сохраняющимся квантовым числом является полный момент $\hbar J$, т.е. собственное значение генератора двумерных вращений $-i\hbar\partial/\partial\varphi + \hbar\sigma_3/2$ [22]. Орбитальный момент $\hbar M = \hbar(J \mp 1/2)$ является собственным значением оператора $-i\hbar\partial/\partial\varphi$, собственные функции которого равны [23, 24][2)]

$$\Phi_M(\varphi)=\frac{1}{2\pi}e^{iM\varphi},\quad M=\delta+m;\qquad \delta=0,\,1/2,\quad m=0,\pm1,\pm2,\ldots \quad (3)$$

Полагая

$$E=m_*v_{\rm F}^2\varepsilon,\quad \mathbf{x}=l_{\rm F}\boldsymbol{\rho},\quad \boldsymbol{\rho}=(\rho\cos\varphi,\rho\sin\varphi),$$

для волновой функции с заданным полным моментом имеем

$$\psi_{\varepsilon,J}(\boldsymbol{\rho})=\frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}}e^{iJ\varphi}\begin{pmatrix}e^{-i\varphi/2}F(\rho)\\ ie^{+i\varphi/2}G(\rho)\end{pmatrix}. \quad (4)$$

[1)]e-mail: narozhny@theor.mephi.ru; lozovik@isan.troitsk.ru

[2)]Полуцелое квантование орбитального момента реализуется в двумерных циркулярных квантовых точках с нечетным числом электронов [25].

Функции $F(\rho)$ и $G(\rho)$ удовлетворяют двумерному радиальному уравнению Дирака:

$$H_{\rm D}\Psi_{\varepsilon,J}(\rho) = \varepsilon\Psi_{\varepsilon,J}(\rho),\ \ \Psi_{\varepsilon,J} = \begin{pmatrix} F(\rho) \\ G(\rho) \end{pmatrix},$$

$$H_{\rm D} = \begin{pmatrix} 1 - \dfrac{q}{\rho} & \dfrac{J}{\rho} + \dfrac{d}{d\rho} \\ \dfrac{J}{\rho} - \dfrac{d}{d\rho} & -1 - \dfrac{q}{\rho} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

которое с точностью до обозначений совпадает с системой для радиальных функций в трехмерной задаче [26]. Однако в двумерном случае возможно значение $J = 0$, а также полуцелые значения $J = m + 1/2$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$.

Вопрос о глубоких уровнях (т.е. об уровнях с энергией, сравнимой с шириной щели) системы (5), который для примесных полупроводников, по-видимому, впервые рассматривался в работе [27] (см. также [28]), в уравнении Дирака с зарядом ядра $Z > 137$ был поставлен в пионерской работе [29] и подробно обсуждался в работах [20] и в обзоре [21]. Для низшего состояния с $J = 1/2$ в [11] вычислено, в частности, критическое значение $q_{cr} = Z_{cr}\alpha_{\rm F}$, т.е. то значение заряда, при котором данный уровень достигает границы нижнего континуума решений уравнения (5). Обсуждается также вопрос о возможной экранировке заряда примеси при $q > q_{cr}$ за счет рождения электрон-дырочных пар по аналогии со сценарием, рассмотренным в [21]. Однако основным в двумерной кулоновской задаче является уровень с $J = 0$. Именно он первым опускается до границы нижнего континуума. Наша работа посвящена обсуждению свойств преимущественно этого состояния. Отметим, что уравнение (5) с $J = 0$ определяет также спектр энергий примесных состояний в оптических и экситонных изоляторах [28].

Задача поставлена, если наряду с системой (5) указаны физически приемлемые граничные условия для волновых функций. В данном случае это эквивалентно самосопряженности соответствующего дифференциальному выражению $H_{\rm D}$ гамильтониана, действующего в гильбертовом пространстве квадратично интегрируемых функций с эрмитовым скалярным произведением

$$(\Psi_1, \Psi_2) = \int_0^\infty \{F_1^*(\rho)F_2(\rho) + G_1^*(\rho)G_2(\rho)\}d\rho.$$

Поскольку кулоновский потенциал $V_{\rm C}(\rho)$ вымирает на больших расстояниях, значениям $\varepsilon \geq 1$ отвечает верхний континуум решений уравнения Дирака, значениям $\varepsilon \leq -1$ – нижний континуум, а области $-1 < \varepsilon < 1$ – дискретный спектр. Полагая

$$r = 2\lambda\rho, \quad \lambda = \sqrt{1-\varepsilon^2} \geq 0, \quad \sigma = \sqrt{J^2 - q^2} > 0 \tag{6}$$

и следуя [26], получаем убывающее на бесконечности решение уравнения (5):

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = C\sqrt{1 \pm \varepsilon}e^{-r/2}r^\sigma \Big\{\Psi(a, c; r) \mp \mp \left(J - \frac{q}{\lambda}\right)\Psi(a+1, c; r)\Big\}. \tag{7}$$

Здесь C – постоянный множитель, $\Psi(a, c; r)$ – функция Трикоми [30] с параметрами $a = \sigma - \varepsilon q/\lambda$, $c = 1 + 2\sigma$, а верхние (нижние) знаки относятся к функции $F\,(G)$.

На малых расстояниях решение (7) имеет структуру

$$\Psi_{\varepsilon,J}(\rho \to 0) = C_\sigma\Bigg\{u_\sigma\rho^\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{q}{J+\sigma} \end{pmatrix} + u_{-\sigma}\rho^{-\sigma} \begin{pmatrix} 1 \\ \dfrac{q}{J-\sigma} \end{pmatrix}\Bigg\}, \quad \sigma \neq \frac{1}{2}, 0, \tag{8}$$

где

$$u_{\pm\sigma} = \frac{\Gamma(\mp 2\sigma)(2\lambda)^{\pm\sigma}}{\Gamma\left(1 \mp \sigma - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)}[q\sqrt{1-\varepsilon} - (J \pm \sigma)\sqrt{1+\varepsilon}]. \tag{9}$$

(При $\sigma = 1/2$, 0 в асимптотике (8) появляются логарифмические слагаемые.)

Поскольку собственные значения дифференциального оператора $H_{\rm D}$ могут быть сколь угодно большими, отвечающий ему оператор H является неограниченным. В соответствии с теорией фон Неймана таких операторов (см. также работу Кейза [31]) приходим при $0 < \sigma < 1/2$ к условию

$$\frac{u_\sigma}{u_{-\sigma}} = \left(\frac{u_\sigma}{u_{-\sigma}}\right)^* = \tan\theta_\sigma(J), \quad -\frac{\pi}{2} \leq \theta_\sigma(J) \leq \frac{\pi}{2}. \tag{10}$$

При $1/2 < \sigma < |J|$ реализуется так называемое встроенное граничное условие и для энергии справедлив двумерный аналог формулы Зоммерфельда (см., например, равенство (4.19) работы [6], в котором следует положить $\alpha \to q > 0$, $M = 1$, $\gamma(j) = \sqrt{J^2 - q^2}$, $J \neq 0$). Условие (10) определяет ассоциированное с дифференциальным оператором $H_{\rm D}$ однопараметрическое семейство самосопряженных операторов H_{θ_σ}.

Если же $q > |J|$, то вместо (10) имеем

$$\frac{u_\tau}{u_{-\tau}} = \left(\frac{u_{-\tau}}{u_\tau}\right)^* = e^{2i\theta_\tau(J)},\ \ {\rm Im}\,\theta_\tau(J) = 0, \tag{11}$$

$\tau = \sqrt{q^2 - J^2} > 0$, где амплитуды $u_{\pm\tau}$ получаются из (9) заменой $\sigma \to i\tau$. Отсюда следует, в частности, уравнение

$$\arg\Gamma\left[2i\sqrt{\left(q_{cr}^{(n)}\right)^2 - J^2}\right] = \sqrt{\left(q_{cr}^{(n)}\right)^2 - J^2} \times \\ \times \ln\left(2q_{cr}^{(n)}\right) - \theta_\tau(J) + \pi n, \;\; n = 0, 1, 2, \dots \quad (12)$$

для критического заряда $q_{cr}^{(n)} = Z_{cr}\alpha_{\mathrm{F}}$, при котором n-й уровень с заданным квантовым числом J достигает границы нижнего континуума.

Таблица 1

Значения критического заряда $q_{cr}^{(n)}(J) = Z_{cr}^{(n)}(J)\alpha_{\mathrm{F}}$, при которых низший ($n = 0$), и первый возбужденный, ($n = 1$), уровни с данным значением J достигают границы нижнего континуума при радиусе обрезания $R = 1/25$

$R = 1/25$	$J = 0$	$J = 1/2$	$J = -1/2$
$q_{cr}^{(0)}(J)$	0.61	0.87	1.09
$q_{cr}^{(1)}(J)$	1.64	1.54	1.82

Равенства (10) и (11) определяют необходимые граничные условия для решений системы (5). Чтобы фиксировать параметры $\theta_\sigma(J)$ и $\theta_\tau(J)$, требуются дополнительные физические соображения. Согласно Померанчуку и Смородинскому [29] нужно рассмотреть кулоновский потенциал, модифицированный на малых расстояниях ($\rho \le R_0 \ll 1$):

$$V_{R_0}(\rho) = -\frac{q}{R_0}\begin{cases} R_0/\rho, & \rho \ge R_0, \\ f(\rho/R_0), & \rho \le R_0. \end{cases} \quad (13)$$

Уравнение (5) с заменой $V_{\mathrm{C}}(\rho) \to V_{R_0}(\rho)$ имеет аналитическое решение для $f(\rho/R_0) \equiv 1$. В этой модели, полагая для краткости $R_0 = R$, при $J \ne 0$ получаем

$$\operatorname{tg}\theta_\sigma(J) = \\ = -\frac{(J+\sigma)[qJ_{\mp 1/2\pm J}(q) \mp (J-\sigma)J_{\pm 1/2\pm J}(q)]R^{-\sigma}}{(J-\sigma)[qJ_{\mp 1/2\pm J}(q) \mp (J+\sigma)J_{\pm 1/2\pm J}(q)]R^{\sigma}}, \quad (14)$$

где $J_\nu(q)$ – функции Бесселя, а верхние (нижние) знаки отвечают $J > 0$ ($J < 0$).

При $q > |J| > 0$, полагая здесь $\sigma = i\tau$, приходим к равенству

$$\exp[2i\theta_\tau(J)] = \operatorname{tg}\theta_{i\tau}(J), \quad \tau = \sqrt{q^2 - J^2} > 0. \quad (15)$$

В случае $J = 0$ даже при замене $V_{\mathrm{C}}(\rho) \to V_{R_0}(\rho)$ остается неопределенность

$$\exp(2i\theta_\tau) = \exp\left(2iq\ln\frac{1}{R} - 2i\vartheta_0\right), \quad \mathrm{Im}\vartheta_0 = 0, \quad (16)$$

причем

$$R = R_0 e^{-f_0}, \quad f_0 = \int_0^1 f(x)dx.$$

Вместе с тем можно показать, что $\vartheta_0 = 0$. Это равенство следует из требования, что при выключении взаимодействия дискретные уровни из спектра исчезают, т.е. $\varepsilon_{J=0}(q) \to 0$ при $q \to 0$. Заметим, что при значении $J = 0$ аналитическое рассмотрение возможно при любой форме модификации кулоновского потенциала на малых расстояниях. При этом зависимость $\varepsilon_{J=0}(q)$ энергии, в том числе основного состояния, от заряда определяется из уравнения

$$\frac{(1-\varepsilon-i\lambda)(2\lambda)^{iq}\Gamma(-2iq)\Gamma\left(1+iq-\frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)}{(1-\varepsilon+i\lambda)(2\lambda)^{-iq}\Gamma(2iq)\Gamma\left(1-iq-\frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)} = \\ = \exp\left(2iq\ln\frac{1}{R}\right) \quad (17)$$

при всех $0 < q \le q_{cr}$.

Уравнение (12) с учетом равенств (14)–(16) определяет критическое значение заряда $q_{cr}(J;R)$ в зависимости от квантового числа J и радиуса обрезания R (см. табл. 1), а уравнения (10) и (11) с учетом (14) и (15) – зависимость энергии $\varepsilon_J(q,R)$ от заряда при заданном радиусе обрезания (см. рис. 1). Таблица 2

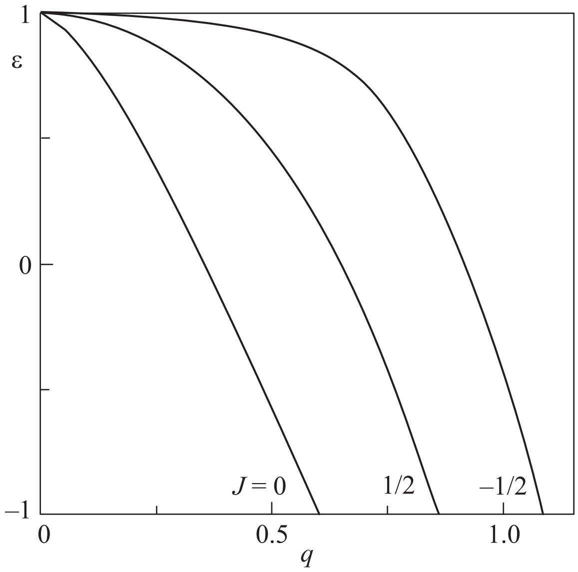

Рис. 1. Зависимости значений низшего уровня энергии $\varepsilon(q, J; R)$ от заряда $q = Z\alpha_{\mathrm{F}}$ при радиусе обрезания кулоновского потенциала $R = 1/25$ для разных значений квантового числа J

демонстрирует зависимость от величины радиуса R критического заряда для основного уровня, а рис. 2 – его энергии согласно (17).

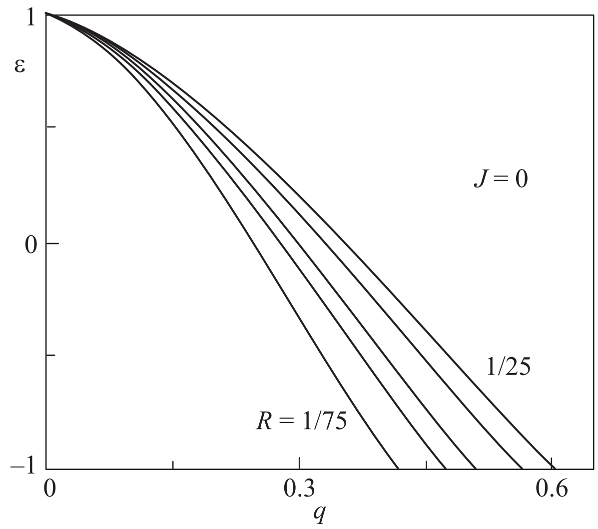

Рис. 2. Зависимость значений основного уровня энергии $\varepsilon(q; J = 0; R)$ от заряда $q = Z\alpha_{\rm F}$ при различных радиусах обрезания кулоновского потенциала R (слева направо $R = 1/75$, $1/50$, $1/40$, $1/30$, $1/25$)

Таблица 2

Значения критического заряда для основного ($q_{cr}^{(0)}$) и первого возбужденного ($q_{cr}^{(1)}$) уровней с полным моментом $J = 0$ при различных радиусах обрезания

R	1/25	1/30	1/40	1/50	1/75
$q_{cr}^{(0)}(0)$	0.61	0.56	0.51	0.47	0.42
$q_{cr}^{(1)}(0)$	1.64	1.56	1.44	1.36	1.23

Параметры $\theta_\sigma(J)$ и $\theta_\tau(J)$ полностью определяют энергетический спектр и стационарные волновые функции задачи (5) при любых зарядах $q = Z\alpha_{\rm F}$.

Так, например, при $\varepsilon < -1$ имеем

$$\begin{pmatrix} F \\ iG \end{pmatrix} = e^{\mp i\pi/2}\sqrt{-\varepsilon \mp 1}(-2ik\rho)^{i\tau}\Big\{Ae^{ik\rho} \times \times \Big[\Psi(g_-, h; -2ik\rho) \mp \Big(J - i\frac{q}{k}\Big)\Psi(g_- + 1, h; -2ik\rho)\Big] \pm \pm Be^{-ik\rho}\Big[\Psi(g_+, h; 2ik\rho) \mp \mp \Big(J + i\frac{q}{k}\Big)\Psi(g_+ + 1, h; 2ik\rho)\Big]\Big\}. \tag{18}$$

Здесь $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$, $\tau = \sqrt{q^2 - J^2}$, $q > q_{cr}$, параметры функций Трикоми

$$g_- = i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q,\ \ g_+ = i\tau + i\frac{\varepsilon}{k}q,\ \ h = 1 + 2i\tau,$$

а верхние (нижние) знаки относятся к функциям $F\,(iG)$. Сравнение с асимптотикой (8) дает

$$u_\tau = [Aa - Bb](2k)^{i\tau}\Gamma(-2i\tau),$$
$$u_{-\tau} = [e^{-\pi\tau}Ab^* - e^{\pi\tau}Ba^*](2k)^{-i\tau}\Gamma(2i\tau), \tag{19}$$

где

$$a = \frac{q\sqrt{-\varepsilon+1} + (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon-1}}{\Gamma\left(1 - i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)},$$
$$b = \frac{q\sqrt{-\varepsilon+1} - (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon-1}}{\Gamma\left(1 - i\tau + i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}.$$

С учетом равенства (11) получаем

$$e^{-\pi\tau}\frac{B}{A} = e^{2i\delta_J(k;q)} = \frac{f_J^*(k;q)}{f_J(k;q)},\ \ A = \frac{e^{i\delta_J}}{\sqrt{2\pi(-\varepsilon)}}e^{\frac{\pi q(-\varepsilon)}{2k}}. \tag{20}$$

Здесь $\delta_J(k;q)$ – фаза рассеяния,

$$f_J(k;q) = -i(e^{\frac{\pi\tau}{2} - i\varphi_\tau}a - e^{\frac{-\pi\tau}{2} + i\varphi_\tau}b^*)$$

есть функция Йоста, введено обозначение

$$e^{i\varphi_\tau} = \frac{(2k)^{-i\tau}\Gamma(2i\tau)}{(2k)^{i\tau}\Gamma(-2i\tau)}e^{2i\theta_\tau(J)},$$

а постоянный множитель A определяется из условия нормировки волновой функции на $\delta(k - k')$.

Гамовские волновые функции квазистационарных состояний получаются из функций (18), если в них положить постоянную $B = 0$. Это условие приводит к уравнению для спектра комплексных энергий, отвечающих полюсам матрицы рассеяния $S_J(k;q) = \exp[2i\delta_J(k;q)]$:

$$\frac{(-2ik)^{i\tau}[q\sqrt{-\varepsilon+1} + (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon-1}]\Gamma(-2i\tau)}{(-2ik)^{-i\tau}[q\sqrt{-\varepsilon+1} + (iJ + \tau)\sqrt{-\varepsilon-1}]\Gamma(2i\tau)} \times \times \frac{\Gamma\left(1 + i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}{\Gamma\left(1 - i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)} = e^{2i\theta_J(q;R)}. \tag{21}$$

Решения (21) определяют как положение квазидискретного уровня ε_0, так и его ширину γ:

$$\varepsilon = -\varepsilon_0 + \frac{i}{2}\gamma,\ \ \varepsilon_0 > 0,\ \ \gamma > 0, \tag{22}$$

причем при $\gamma \ll \varepsilon_0$

$$k = k_0' - ik_0'',\ \ k_0' = \sqrt{\varepsilon_0^2 - 1} > 0,\ \ k_0'' = \frac{\gamma}{2k_0'} > 0.$$

При этом на больших расстояниях с экспоненциальной точностью имеем

$$\Psi_{\varepsilon,J}(\rho) \propto e^{ik\rho} = e^{ik_0'\rho + k_0''\rho},\quad \rho \gg \frac{1}{|k|},$$

т.е.расходящуюся на бесконечности гамовскую волновую функцию. Противоположный знак γ означал бы наличие квадратично интегрируемого решения системы (5), т.е. связанного состояния с комплексной энергией. Необычный знак перед шириной γ квазистационарного состояния обеспечивает уход дискретного уровня при $q > q_{cr}$ на нефизический лист и непротиворечивость одночастичного приближения [32] в рассматриваемой задаче.

Движение полюсов S-матрицы в плоскости комплексного переменного $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$ вблизи границы нижнего континуума при увеличении заряда q показано на рис. 3. При $q < q_{cr}(J)$ для энергии

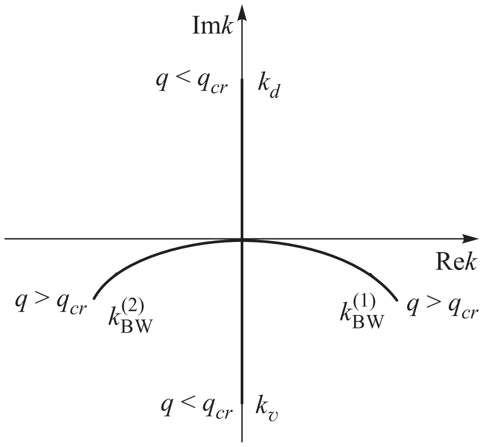

Рис. 3. Движение полюсов S-матрицы в комплексной плоскости $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$ вблизи границы нижнего континуума $\varepsilon = -1$. Стрелками указано направление движения при увеличении заряда $q = Ze^2/\hbar v_{\mathrm{F}}$

дискретного уровня имеем $-1 < \varepsilon_d < 1$, так что $k_d = i\kappa_d$, $\kappa_d > 0$ и отвечающий ему полюс матрицы рассеяния находится на мнимой оси верхней k-полуплоскости, т.е. на первом, физическом листе. При увеличении заряда он приближается к границе нижнего континуума $\varepsilon = -1$, причем навстречу ему также по мнимой оси движется виртуальный уровень k_v, находящийся на втором, нефизическом листе. При $q = q_{cr}(J)$ они сталкиваются, превращаясь в пару брейт-вигнеровских полюсов, находящихся на нефизическом листе. При этом в закритической области ближайший к положительной вещественной полуоси полюс $k_{\mathrm{BW}}^{(1)}$, отвечающий (22), является квазистационарным и проявляется как резонанс с шириной $\gamma \ll \varepsilon_0$ при рассеянии дырок на примеси. Действительно, согласно Фейнману следует считать, что электроны с отрицательной энергией движутся вспять по времени, так что временна́я гамовская волновая функция

$$\Psi(t) \propto e^{-i\varepsilon t} \equiv e^{-i(-\varepsilon)(-t)}$$

затухает с увеличением $(-t)$. Такие электроны отвечают дыркам в море Дирака с положительной энергией, что восстанавливает стандартную интерпретацию квазистационарных состояний с отрицательной энергией (см. ниже соотношение (24)).

В отличие от ситуации в случае "парадокса Клейна" [33] в рассматриваемой релятивистской кулоновской задаче матрица рассеяния $S_J = \exp\left[2i\delta_J(k;q)\right]$ (20) унитарна и при $Z > Z_{cr}$. Поэтому рождение электрон-дырочных пар отсутствует, что является дополнительным аргументом в пользу законности одночастичного приближения для уравнения Дирака.

В специфическом для циркулярной задачи случае $J = 0$ с учетом модификации (13) имеем

$$\frac{(-2ik)^{iq}(1-\varepsilon-k)\Gamma(-2iq)\Gamma\left(1+iq-i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}{(-2ik)^{-iq}(1-\varepsilon+k)\Gamma(2iq)\Gamma\left(1-iq-i\frac{\varepsilon}{k}q\right)} = e^{2iq\ln 1/R}. \tag{23}$$

Зависимости положения уровня $\varepsilon_0(q,R)$ и его ширины $\gamma(q,R)$ в широкой области изменения заряда при двух значениях радиуса R показаны на рис. 4.

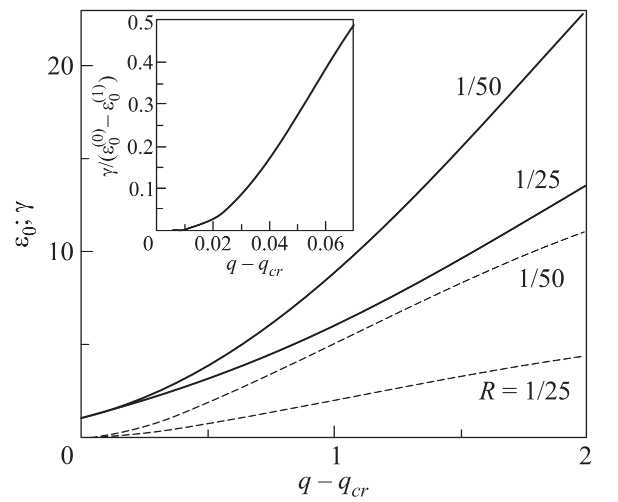

Рис. 4. Зависимости положения резонанса $\varepsilon_0(q; J = 0; R)$ (сплошные линии) и ширины уровня $\gamma(q; J = 0; R)$ (штриховые линии) от разности $q - q_{cr}$ при значениях радиуса обрезания кулоновского потенциала $R = 1/25$ и $1/50$. На вставке показана зависимость отношения ширины основного уровня к разности значений его энергии и энергии первого возбужденного уровня от $q - q_{cr}$ при $R = 1/25$ в физически интересной области, где это отношение не превышает 0.5 и резонансы не перекрываются

На вставке к рис. 4 приведено отношение ширины уровня γ к разности энергий основного и первого возбужденного состояний, $\varepsilon_0^{(0)} - \varepsilon_0^{(1)}$, в физически интересной области $\Delta q = q - q_{cr}^{(0)} \ll 1$, когда $\gamma/(\varepsilon_0^{(0)} - \varepsilon_0^{(1)}) \leq 0.5$, квазистационарные уровни не перекрываются и полюс S-матрицы проявляется как резонанс в рассеянии дырок на кулоновской примеси.

Подчеркнем, что с учетом модификации (13) гамильтониан $H_{\mathrm{D}}(\rho; J; R)$ становится самосопряженным, а его собственные функции образуют полную систему. Электронный спектр энергий, $-1 \le \varepsilon < \infty$, не перекрывается с дырочным, $0 < \varepsilon_p < \infty$, $\varepsilon_p = -\varepsilon$ при $\varepsilon < -1$. (При $Z = Z_{cr}$ состояние с энергией $\varepsilon_d = -1$ является дискретным, в то время как состояния с $\varepsilon < -1$ относятся к непрерывному спектру.) Поэтому законным является вторичное квантование по Фарри [34] на базе данного полного набора функций. При этом для комплексной энергии квазистационарного состояния дырок имеем

$$\varepsilon_p = \varepsilon_0 - \frac{i}{2}\gamma, \;\; \varepsilon_0 > 0, \;\; \gamma > 0, \tag{24}$$

т.е. обычное выражение для энергии квазидискретного уровня.

Указанное квантование непротиворечиво при любых значениях заряда примеси. Поэтому нет никаких оснований ожидать, что при $Z > Z_{cr}$ произойдет экранировка заряда примеси электронами, рожденными вместе с дырками, обсуждаемая в [11].

Учитывая указанное в [4, 11] значение $\alpha_{\mathrm{F}} = 0.4$ и результаты табл. 1, в рассматриваемом случае получаем

$$Z_{cr} = 1.52,\ 2.17,\ 2.72,\ 3.32 \tag{25}$$

для $J = 0,\ +1/2,\ -1/2,\ 1$ соответственно. Поэтому в качестве "сверхкритических" примесей достаточно использовать атомные ядра или ионы с зарядом $Z = 2,\ 3,\ 3$ и 4.

Тогда согласно [11] эти значения за счет электронов, рожденных вместе с дырками из дираковского вакуума, уменьшатся на единицу и эффективные заряды будут равны $Z_{\mathrm{eff}} = 1,\ 2,\ 2$ и 3. Видно, что различие между Z и Z_{eff} существенно. Для $J = 0$ оно достигает 50 %.

Итак, "обрезание", т.е. регуляризация кулоновского потенциала на малых расстояниях, обеспечивает самосопряженность дираковского гамильтониана и, следовательно, определяет полный ортонормированный набор решений уравнения Дирака. Это означает непротиворечивость одночастичного приближения при любых значениях кулоновского заряда, в том числе в закритической области $Z > Z_{cr}$.

При этом любой дискретный уровень с энергией $E = \varepsilon mc^2$, полным моментом J и радиальным квантовым числом n углубляется с ростом заряда примеси Z, достигает границы нижнего континуума $\epsilon = -1$ при значении Z, равном критическому заряду $Z_{cr}(J, n)$, а затем исчезает из спектра. Поэтому в основном состоянии системы не заполнены все электронные состояния зоны проводимости (верхний континуум) и связанные состояния, а электронные состояния валентной зоны (море Дирака) полностью заполнены. При вторичном квантовании по Фарри на основе полного набора собственных функций самосопряженного кулоновского гамильтониана основному состоянию отвечает полное отсутствие квазичастиц (как электронов, так и дырок). Это заключение не зависит от того, реализуются или нет в рассматриваемой двухмерной задаче полуцелые орбитальные моменты.

Таким образом, экранировка сверхкритического заряда по сценарию работы [11] невозможна. Чтобы подтвердить или опровергнуть это утверждение, достаточно измерить энергию нескольких кулоновских уровней с $Z > Z_{cr}$. Кроме того, на основе таких экспериментальных данных можно сделать заключение о том, реализуются или нет в рассматриваемой системе полуцелые орбитальные моменты, возможные в двумерной задаче.

Авторы благодарны Д.Н. Воскресенскому и В.Ф. Елесину за стимулирующие дискуссии. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 13-02-00372) и гранта Президента РФ для государственной поддержки ведущих научных школ Российской Федерации НШ-4829.2014.2.

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, and A.A. Firsov, Nature Lett. **438**, 197 (2005).
2. C.L. Kane and E.J. Mele, Phys. Rev. Lett. **95**, 226801 (2005).
3. G. Giovannetti, P.A. Khomyakov, G. Brocks, P.J. Kelly, and J. van den Brink, Phys. Rev. B **76**, 073103 (2007).
4. S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, A.V. Fedorov, P.N. First, W.A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A.H. Castro Neto, and A. Lanzara, Nature Mat. **6**, 770 (2007).
5. R.R. Biswas and D.T. Son, Phys. Rev. B **76**, 205122 (2007).
6. D.S. Novikov, Phys. Rev. B **76**, 245435 (2007).
7. V.M. Pereira, J. Nilsson, and A.H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801 (2007).
8. M.M. Fogler, D.S. Novikov, and B.I. Shklovskii, Phys. Rev. B **76**, 233402 (2007).
9. A.V. Shytov, M.I. Katsnelson, and L.S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801 (2007).
10. I.S. Terekhov, A.I. Milstein, V.N. Kotov and O.P. Sushkov, Phys. Rev. Lett. **100**, 076803 (2008).

11. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **78**, 085101 (2008).
12. W. Zhu, Zh. Wang, Q. Shi, K. Y. Szeto, J. Che, and J. G. Hou, Phys. Rev. B **79**, 155430 (2009).
13. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli, B. Dora, M. Farjam, J. Fink, D. Marchenko, T. Pichler, K. Ziegler, S. Simonucci, M. S. Dresselhaus, M. Knupfer, B. Buchner, and A. Gruneis, Nano Lett. **10**, 3360 (2010).
14. S. Casolo, R. Martinazzo, and G. F. Tantardini, J. Phys. Chem. C **115**, 3250 (2011).
15. M. Morgenstern, Phys. Stat. Sol. B **248**, 2423 (2011).
16. Y. Wang, V. W. Brar, A. V. Shytov, Q. Wu, W. Regan, H.-Z. Tsai, A. Zettl, L. S. Levitov, and M. F. Crommie, Nature Phys. **8**, 653 (2012).
17. J.-L. Zhu, S. Sun, and N. Yang, Phys. Rev. B **85**, 035429 (2012).
18. D. V. Fedorov, M. Gradhand, S. Ostanin, I. V. Maznichenko, A. Ernst, J. Fabian, and I. Mertig, Phys. Rev. Lett. **110**, 156602 (2013).
19. T. P. Kaloni, R. P. Joshi, N. P. Adhikari, and U. Schwingenschlögl, Appl. Phys. Lett. **104**, 073116 (2014).
20. В. С. Попов, ЯФ **12**, 1429 (1970); ЖЭТФ **59**, 965 (1970); ЖЭТФ **60**, 1228 (1971).
21. Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, УФН **105**, 403 (1971).
22. D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, Phys. Rev. B **29**, 1685 (1984).
23. W. Pauli, Helv. Phys. Acta **12**, 147 (1939).
24. C. van Vinter, Ann. Phys. **47**, 232 (1968).
25. V. D. Mur, N. B. Narozhny, A. N. Petrosyan, and Yu. E. Lozovik, Pis'ma v ZhETF **88**, 786 (2008).
26. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1969).
27. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **45**, 364 (1963).
28. А. С. Александров, В. Ф. Елесин, ЖЭТФ **72**, 1970 (1977).
29. I. Pomeranchuk and Ya. Smorodinsky, J. Phys. USSR **9**, 97 (1945).
30. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, М. (1973), т. 1.
31. K. M. Case, Phys. Rev. **80**, 797 (1950).
32. В. Д. Мур, В. С. Попов, ТМФ **27**, 204 (1976).
33. O. Klein, Z. Physik **53**, 157 (1929).
34. W. H. Furry, Phys. Rev. **81**, 115 (1951).