81.05.Uw 72.10.-d 73.63.-b 73.40.-c

E-mail: ktitorov@mail.ioffe.ru, nef2@mail.ru

Электронные состояния в однослойном графене с короткодействующими дефектами. Сепарабельный в импульсном представлении потенциал

С.А. Ктиторов, Ю.И. Кузьмин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе, Российская Академия наук,

Санкт-Петербург 194021, Россия,

Н.Е. Фирсова,

Институт проблем машиноведения,

Российская Академия наук, Санкт-Петербург 199178, Россия,

7 ноября 2010 г.

Аннотация

Изучены электронные состояния в монослойном графене с короткодействующими дефектами с асимметричным по зонному индексу потенциалом. Исследование выполнено для

2+1-мерного уравнения Дирака с потенциалом сепарабельным в представлении углового момента. Полученное в данной работе характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний сравнивается с полученным нами ранее другим методом уравнением для той же задачи. Использованное здесь представление позволило удовлетворительно регуляризовать эту некорректную по Адамару задачу с сингулярным потенциалом.

Введение

В течение последних нескольких лет исследование электронного спектра графена привлекало большое внимание исследователей (см., например обзор [2]). Точечные дефекты были рассмотрены в работах [3], [4], [5]. В наших работах [6], [7] была предложена новая модель, принимающая во внимание асимметрию матричных элементов потенциала дефекта по зонному индексу. Это означает, что возмущение в общем случае описывется некоторой эрмитовой матрицей. Мы используем представление, в котором эта матрица диагональна. Междолинные переходы не учитыватся (см. ниже). Впервые характеристическое уравнение было получено в рамках этой модели в работе [6]; теория рассеяния была построена в [7]. Было установлено, что сингулярность дельтаобразного потенциала приводит к некорректности соответствующей краевой задачи, что влечет необходимость регуляризации. Настоящая работа посвящена этой проблеме. Найденное здесь характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний сравнивается с полученным нами ранее другим методом уравнением для той же задачи. Сделан вывод, что примененный в данной статье метод регуляризации приводит к корректной постановке задачи. В частности, спектр гладким образом зависит от вариации условий сшивания. Несмотря на возникающие трудности, дельтаобразный потенциал чрезвычайно популярен, особенно в электронной кинетике, поэтому эта проблема заслуживает детального анализа. Теория процессов переноса при наличии резонансного рассеяния и теория оптического поглощения в графене требуют непертурбативного подхода к анализу электронных состояний в присутствии дефектов. Это делает необходимым рассмотрение точно решаемых моделей дефектов. Одна из таких моделей – потенциал в виде дельта-функции, определенной на сфере соотвтствующей размерности. В случае двумерного кристалла – это окружность. В работе [1] рассмотрена двухзонная квазирелятивистская проблема связанных и резонансных состояний, описываемых уравнением Дирака в случае двухзонной квазирелятивистской проблемы для трехмерного узкощелевого и бесщелевого полупроводника с таким дефектом. При этом была использована дельта-функционная модель. Важно, что этот потенциал не имеет сингулярности при $r = 0$ и он является сепарабельным в представлении углового момента. В настоящей работе мы развиваем этот подход применительно к электронным состояниям монослойного графена. Мы учитываем возможную асимметрию матричных элементов потенциала дефекта по зонным индексам благодаря локальному нарушению симметрии подрешеток, что эквивалентно введению локального возмущения потенциала и массы. Цель данной работы состоит в регуляризации данной некорректной по Адамару задачи.

1 Основные уравнения

Уравнение Дирака, описывающее электронные состояния в графене, имеет вид:

$$\left(-i\hbar v_F \sum_{\mu=1}^{2} \gamma_\mu \partial_\mu - \gamma_0 \left(m + \delta m\right) v_F^2\right) \psi = \left(E - V\right) \psi, \tag{1}$$

где v_F – фермиевская скорость зонных электронов, γ_μ – матрицы Дирака:

$$\gamma_0 = \sigma_3, \gamma_1 = \sigma_1, \gamma_2 = i\sigma_2,$$

σ_i – матрицы Паули, $2m{v_F}^2 = E_g$ – запрещенная зона, $\psi\left(\mathbf{r}\right)$ – двухкомпонентный спинор:

$$\psi\left(\mathbf{r}\right) = \begin{pmatrix} f\left(\mathbf{r}\right) \\ g\left(\mathbf{r}\right) \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Щель в электронном спектре графена может возникнуть, например, благодаря взаимному сдвигу подрешеток под влиянием подложки [8]. Спинорная структура учитывает двухподрешеточную структуру графена. $\delta m\left(\mathbf{r}\right)$ и $V(\mathbf{r})$ – локальное возмущение массы (щели) и потенциала. Локальное возмущение массы может быть индуцировано дефектом в пленке графена или на поверхности подложки [8]. Мы рассматриваем здесь дельта-функционную модель дефекта:

$$\delta m\left(\mathbf{r}\right) = -b\delta(r - r_0), V\left(\mathbf{r}\right) = -a\delta(r - r_0), \tag{3}$$

где r и r_0 радиальная координата и радиус возмущения соответственно. Такое короткодействующее возмущение было использовано для решения проблемы связанных и резонансных состояний для узкощелевого и бесщелевого трехмерных полупроводников в работе [1]. Иногда оказывается более удобно вместо массового и потенциального возмущений вводить асимметричный по зонам потенциал:

$$diag(V_1, V_2). \tag{4}$$

где

$$V_1 = V_1^0\delta(r - r_0), V_2 = V_2^0\delta(r - r_0). \tag{5}$$

Компоненты этого потенциала следующим образом связаны с параметрами a, b:

$$-V_1^0 = a + b,\ -V_2^0 = a - b. \tag{6}$$

Дельта-функционное возмущение – это простая модель короткодействующего дефекта. Конечный радиус r_0 способствует регуляризации поставленной задачи. Проблема в том, что дельта-функционный потенциал делает дираковскую задачу некорректной по Адамару [14]. Это значит, в частности, что результаты могут зависить от порядка предельных переходов. Конечность радиуса r_0 позволяет также исключить глубокие состояния, нефизические в континуальном приближении. Конечный радиус r_0 приводит к появлению форм-фактора потенциала в импульсном представлении, который делает неэффективными процессы рассеяния передачей большого квазиимпульса порядка расстояния между точками K и K' в зоне Бриллуэна и, следовательно, к возможности пренебречь междолинными переходами [1].

Введем двумерное преобразование Фурье двухкомпонентной волновой функции (2):

$$f\left(\mathbf{r}\right)=\int\frac{dp_x dp_y}{\left(2\pi\right)^2}e^{i\mathbf{kr}}f_{\mathbf{p}},\ g\left(\mathbf{r}\right)=\int\frac{d^2p}{\left(2\pi\right)^2}e^{i\mathbf{kr}}g_{\mathbf{p}}, \tag{7}$$

где компоненты Фурье $f_{\mathbf{p}}$ and $g_{\mathbf{p}}$ определены обратным преобразованием:

$$f_{\mathbf{p}}=\int dxdye^{-i\mathbf{kr}}f\left(\mathbf{r}\right),\ g_{\mathbf{p}}=\int dxdye^{-i\mathbf{kr}}g\left(\mathbf{r}\right) \tag{8}$$

Обраное преобразование Фурье может быть представлено в виде комбинации преобразования Ханкеля и ряда Фурье по угловой переменной [?]:

$$f_{\mathbf{p}}\equiv f\left(p,\theta\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^n e^{in\theta}f_n\left(p\right),\quad g_{\mathbf{p}}\equiv g\left(p,\theta\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^n e^{in\theta}g_n\left(p\right) \tag{9}$$

$$f_n\left(p\right)=\int_0^\infty drrf_n\left(r\right)J_n\left(pr\right),\quad g_n\left(p\right)=\int_0^\infty drrg_n\left(r\right)J_n\left(pr\right) \tag{10}$$

где $f_m(r)$ – угловая компонента Фурье:

$$f(r,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n(r) e^{in\theta}, \quad g(r,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} g_n(r) e^{in\theta} \tag{11}$$

Переходя к преобразованию Фурье уравнения Дирака (1), мы предварительно рассмотрим два слагаемых, требующих особенного внимания. Градиентные члены имеют вид:

$$-i\left(\widehat{\sigma}_x \partial_x + \widehat{\sigma}_y \partial_y\right) \psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \left(\widehat{p}_x + i\widehat{p}_y\right) g(\mathbf{r}) \\ \left(\widehat{p}_x - i\widehat{p}_y\right) f(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Следовательно, градиентные члены для верхней и нижней компонент спинора принимают в импульсном представлении следующий вид:

$$\begin{pmatrix} \left(p_x + ip_y\right) g(\mathbf{p}) \\ \left(p_x - ip_y\right) f(\mathbf{p}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} pe^{i\theta} g(p,\theta) \\ pe^{-i\theta} f(p,\theta) \end{pmatrix} \tag{13}$$

Подставив (9) в (13), мы получаем:

$$\begin{pmatrix} +i \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n e^{in\theta} g_{n+1}(p) \\ -i \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n e^{in\theta} f_{n-1}(p) \end{pmatrix} \tag{14}$$

Преобразование Фурье $V_i(\mathbf{p})$ потенциала с круговой симметрией может быть разложено в ряд:

$$V_i\left(\left|\mathbf{p} - \mathbf{p}'\right|\right) = \pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} \cdot V_i^n\left(p, p'\right), \tag{15}$$

$$V_i^n\left(p, p'\right) = \int_0^\infty dr \cdot r J_n(pr) V_i(r) J_n\left(p'r\right) \tag{16}$$

где $J_n(pr)$ – функция Бесселя, $i = 1, \quad 2$. Таким образом, мы получаем систему интегральных уравнений:

$$(E-m)\,f_j\,(p)+ipg_j\,(p)-\int dp'\cdot p' f_j\,(p')\,V_1^j\,(p',p)=0, \tag{17}$$

$$(E+m)\,g_j\,(p)-ipf_j\,(p)-\int dp'\cdot p' g_j\,(p')\,V_2^j\,(p',p)=0. \tag{18}$$

Мы положили $n = j - 1/2$, где j – квантовое число псевдоспина, $j = \pm 1/2,\ \pm 3/2\ldots$. В отличие от релятивистской теории, это квантовое число не имеет ничего общего со спином и характеризует вырождение в дираковской точке. Эти уравнения имеют симметрию:

$$f_j \leftrightarrow g_j, E \to -E, j-1/2 \to j+1/2, a \to -a. \tag{19}$$

Потенциалы нулевого радиуса [9] и сепарабельные потенциалы [10] весьма популярны в нерелятивистской теории рассеяния. В то же время уравнение Дирака чрезвычайно чувствительно к сингулярности потенциала [11]. Сингулярность дельта-функционного потенциала может быть ослаблена путем задания дельта-функции на окружности (5) [1]. Подставляя (5) в (15), мы получаем сепарабельный в представлении углового момента потенциал:

$$V_i^j\,(p,p')=v_i^j\,(p)\,v_i^j\,(p')\,, i=1,2 \tag{20}$$

где

$$v_1^j\,(p)=\sqrt{r_0V_1^0}J_{j-1/2}(pr_0), \quad v_2^j\,(p)=\sqrt{r_0V_2^0}J_{j+1/2}(pr_0). \tag{21}$$

Уравнения (17), (18) становятся вырожденными и могут быть записаны в следующем виде:

$$(m-E)\,f_j\,(p)+pg_j\,(p)+v_1^j\,(p)\int_0^\infty dp'p'f_j\,(p')\,v_1^j\,(p')=0, \tag{22}$$

$$(m+E)\,f_j\,(p)+pg_j\,(p)-v_2^j\,(p)\int_0^\infty dp'p'g_j\,(p')\,v_2^j\,(p')=0. \tag{23}$$

2 Характеристическое уравнение

Введем функции

$$F_j\,(E)=\int_0^\infty dp'pf_j\,(p)\,v_1^j\,(p)\,,\quad G_j\,(E)=\int_0^\infty dp'pg_j\,(p)\,v_2^j\,(p)\,,\quad R\,(p)=\left(p^2+m^2-E^2\right)^{-1}. \tag{24}$$

Тогда мы получаем систему алгебраических уравнений

$$F_j=G_j\int_0^\infty dp'p^2R\,(p)\,v_1^j\,(p)\,v_2^j\,(p)-\,(E+m)\,F_j\int_0^\infty dp'pR\,(p)\left(v_1^j\,(p)\right)^2, \tag{25}$$

$$G_j=F_j\int_0^\infty dp'p^2R\,(p)\,v_1^j\,(p)\,v_2^j\,(p)\,+(E-m)\,G_j\int_0^\infty dpp^2R\,(p)\left(v_2^j\,(p)\right)^2. \tag{26}$$

Условие разрешимости этой системы приводит нас к характеристическому уравнению, корни которого определяют связанные и резонансные состояния:

$$\left[1+(m+E)\int_0^\infty dppR(p)\left(v_1^j(p)\right)^2\right]\cdot\left[1+(m-E)\int_0^\infty dppR(p)\left(v_2^j(p)\right)^2\right]$$

$$=\left[\int_0^\infty dpp^2R(p)\,v_1^j(p)\,v_2^j(p)\right]^2. \qquad (27)$$

Используя известную формулу [12]

$$\int_0^\infty dx\frac{x^{\mu-\nu+2n+1}}{x^2+z^2}J_\mu(bx)\,J_\nu(cx)=(-1)^n\,z^{\mu-\nu+2n}I_\nu(x)\,K_\mu(x) \qquad (28)$$

мы получаем

$$\left[1+(m+E)\,V_1^0I_{j-1/2}(\kappa r_0)\,K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right]\left[1+(m-E)\,V_2^0I_{j+1/2}(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}(\kappa r_0)\right]=$$

$$=(m+E)\,(m-E)\,I_{j-1/2}^2(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}^2(\kappa r_0)\,, \qquad (29)$$

где $\kappa^2=(m^2-E^2)$, $I_n(x)$, $K_n(x)$ – модифицированные функции Бесселя. Используя тождество [13]

$$I_\nu(x)\,K_{\nu+1}(x)+I_{\nu+1}(x)\,K_\nu(x)=1/x, \qquad (30)$$

мы получаем характеристическое уравнение:

$$\kappa\left[I_{j-1/2}(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}(\kappa r_0)+I_{j+1/2}(\kappa r_0)\,K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right]+$$
$$(m+E)\,V_1^0I_{j-1/2}(\kappa r_0)\,K_{j-1/2}(\kappa r_0)+(m-E)\,V_2^0I_{j+1/2}(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}(\kappa r_0)=0. \qquad (31)$$

Используя соотношения (6) получаем уравнение

$$\kappa\left[I_{j-1/2}(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}(\kappa r_0)+K_{j-1/2}(\kappa r_0)\,I_{j+1/2}(\kappa r_0)\right]=$$

$$\Big[(m-E)\,(a-b)\,I_{j+1/2}\,(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}\,(\kappa r_0)+(a+b)\,(m+E)I_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\,K_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\Big]\,. \tag{32}$$

Сравним это уравнение с полученным нами ранее другим методом [7]:

$$p\left(J_{j-1/2}\,(pr_0)\,H^{(1)}_{j+1/2}\,(pr_0)-J_{j+1/2}\,(pr_0)\,H^{(1)}_{j-1/2}\,(pr_0)\right)\;=$$

$$T(a,b)\left[\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}\,(a-b)\,J_{j+1/2}\,(pr_0)\,H^{(1)}_{j+1/2}\,(pr_0)+\sqrt{\frac{E+m}{E-m}}\,(a+b)\,J_{j-1/2}\,(pr_0)\,H^{(1)}_{j-1/2}\,(r_0)\right], \tag{33}$$

где

$$T(a,b)=\frac{\tan\left(\sqrt{a^2-b^2}\right)}{\sqrt{a^2-b^2}}, \tag{34}$$

$H^{(1)}_n\,(z)$ – функция Ханкеля, $p=\sqrt{E^2-m^2}$. Выполнив аналитическое продолжение от случая зонных состояний с $E^2 > m^2$ к противоположному случаю связанных $E^2<m^2$, мы получаем уравнение

$$\kappa\left[I_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}\,(\kappa r_0)+K_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\,I_{j+1/2}\,(\kappa r_0)\right]=$$

$$T(a,b)\left[(m-E)\,(a-b)\,I_{j+1/2}\,(\kappa r_0)\,K_{j+1/2}\,(\kappa r_0)+(a+b)\,(m+E)I_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\,K_{j-1/2}\,(\kappa r_0)\right]. \tag{35}$$

Мы видим, что единственное отличие между формулами (32) и (35) состоит в присутствии множителя (34) в уравнении, полученном в [7]. Эти уравнения практически идентичны в пределе

$$a^2-b^2\longrightarrow 0,\quad T\,(a,b)\longrightarrow 1. \tag{36}$$

Этот предел может быть достигнут на линии $a^2 - b^2 = 0$, или когда a и b малы. Причина отличия этих уравнений состоит в следующем. Дельта-функционный потенциал в уравнении Дирака порождает граничную задачу, некорректную по Адамару [14]. Такая проблема нуждается в регуляризации. При этом в настоящей работе и в работе [7] использовались разные методы регуляризации. В работе [7] сохранялась сингулярность возмущения и для регуляризации использовалась специальная схема сшивания решений, в то время как в настоящей работе регуляризация достигалась за счет сглаживающего свойства преобразования Фурье. В частности, потенциал принял сепарабельный вид с нелокальным ядром $v_i^l(p) = \sqrt{r_0 V_i^0} J_{l+1/2}(pr_0)$ (см. формулу (21)). Именно эта нелокальность играет центральную роль в регуляризации. Уравнения (32) и (35) имеют асимптотически совпадающие решения, когда справедливо (36). в тоже время, множества их решений совершенно различны вне этой области параметров a и b. Более того, уравнение (35) имеет значительно более богатое множество решений, чем уравнение (32) [7] благодаря периодичности тангенса, присутствующего в (34). Мы приходим к заключению, что более богатое множество решений уравнения (35) является артифактом модели точечного взаимодействия. Наконец, модель кольцевой ямы, исследованная в [15], не воспроизводит это богатое множество решений даже в пределе нулевой ширины кольца и бесконечной глубины ямы. Следовательно, уравнение, полученное в настоящей работе, можно рассматривать как решение коррекно регуляризованной граничной задачи.

Заключение

Показано, что метод преобразования Фурье для уравнения Дирака с несимметричным по зонам дельта-функционным потенциалом дефекта приводит к регуляризованной задаче, в которой отсутствуют фантомные дополнительные решения, являющиеся артифактом точечного взаимодейстия. Этот подход регуляризует некрректную по Адамару задачи.

Список литературы

[1] V.I. Tamarchenko, S.A. Ktitorov, ФТТ, **19**, 2970 (1977).

[2] A.H. Castro Neto, F. Guinea, et al, arXiv: 0709.1163 (2008).

[3] D.M. Basko, Phys. Rev. **B** 78, 115432 (2008).

[4] D.S. Novikov, Phys. Rev. **B** 76, 245435 (2007).

[5] A. Matulis, F.M. Peeters, Phys. Rev. **B** 77, 115423 (2008).

[6] Natalie E. Firsova, Sergey A. Ktitorov, Philip A. Pogorelov, Physics Letters **A** A 373 525 (2009).

[7] Natalie E. Firsova, Sergey A. Ktitorov, Physics Letters **A** 374, 1270 (2010).

[8] Aurelien Lherbier, X. Blaze, et al, Phys. Rev. Letters, **101**, 036808-1 (2008).

[9] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский, *Потенциалы нулевого радиуса в атомной физике*, Изд. Ленинградского университета, Leningrad, 1975.

[10] Roger G. Newton, *Scattering theory of waves and particles*, Springer-Verlag, New York, 1982.

[11] Я.Б. Зельдович и В.С. Попов, УФН, **14**, 673 (1972).

[12] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции*, Москва, Наука, 1983.

[13] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, ФМ, Москва, 1963.

[14] L.E. Payne, *Some general remarks on improperly posed problems for partial differential equations.* In Lecture Notes in Mathematics **316**, Symposium on Non-Well-Posed Problems and Logarithmic Convexity. Edited by A. Dold and B. Eckmann, Edinburg, 1972.

[15] С.А. Ктиторов, Н.Е. Фирсова, ФТТ, **53**, 376 (2011).