

БЕЗМАССОВЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ГРАФЕНЕ В ОКРЕСТНОСТИ КУЛОНОВСКИХ ПРИМЕСЕЙ

А. И. Бреев^{a*}, Д. М. Гитман^{a,b**}

^a Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

^b Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 января 2021 г.,
после переработки 2 февраля 2021 г.
Принята к публикации 3 февраля 2021 г.

Исследуются низкоэнергетические безмассовые электронные возбуждения в монослое графена в окрестности точечной кулоновской примеси. Предполагается, что такие возбуждения описываются в рамках модели Дирака. Построено семейство самосопряженных гамильтонианов, отвечающих этим возбуждениям для любого заряда примеси, и проведен их спектральный анализ. Показано, что в рассматриваемом случае структура спектров электронных возбуждений качественно другая по сравнению с соответствующими спектрами массивных возбуждений. На основе полученных результатов анализируется локальная поверхностная плотность электронных состояний в графене и ее зависимость от выбора самосопряженных гамильтонианов.

DOI: 10.31857/S0044451021060079

1. ВВЕДЕНИЕ

Присутствие примесей и дефектов может значительно изменять электронные свойства графена. Например, присутствие заряженных примесей, таких как кулоновские центры, оказывает существенное влияние на подвижность носителей заряда [1]. В связи с этим исследование свойств графена при наличии взаимодействия носителей с кулоновскими центрами важно для понимания электронного транспорта в присутствии примесей, см. работы [2–6]. Технически задача облегчается тем обстоятельством, что низкоэнергетические электронные возбуждения в монослое графена во внешнем электромагнитном поле хорошо описываются моделью Дирака, где они представляют собой киральные дираковские фермионы в $2 + 1$ измерениях [7, 8].

Корректное описание таких возбуждений (часто называемых ниже квазичастицами) в окрестности точечной кулоновской примеси требует правильного определения дираковского гамильтониана как само-

сопряженного (в дальнейшем с.с.) оператора в соответствующем гильбертовом пространстве. А для движения электрона в кулоновском поле проблема определения гамильтониана как с.с. оператора является нетривиальной только для ядер с большими Z ($Z > 119$), которые не возникают в лабораторных условиях, для кулоновских примесей в графене этот порог значительно меньше из-за свойств дираковских квазичастиц в дираковской модели графена.

Заметим, что в зависимости от структуры подложки, на которой синтезирован графен, может возникнуть (или не возникнуть) щель в электронном спектре между валентной зоной и зоной проводимости. Это определяется свойствами взаимодействия между слоем графена и подложкой, которое нарушает симметрию между подрешетками, но сохраняет трансляционную симметрию. Для ненулевой щели низкоэнергетические электронные возбуждения в модели Дирака являются массивными фермионами, в то время как, если щель между валентной зоной и зоной проводимости отсутствует, то эти возбуждения являются безмассовыми фермионами. Величину щели можно менять, варьируя химический состав и концентрацию подложки [9].

В предыдущей работе с участием авторов [10] с помощью теории с.с. расширений симметрических

* E-mail: breev@mail.tsu.ru

** E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

операторов построено семейство с.с. гамильтонианов, описывающих электронные возбуждения в графене со щелью для любого значения заряда примеси. На основе метода направляющих функционалов Крейна проведен спектральный анализ таких гамильтонианов. В частности, найдены их спектры и соответствующие полные наборы (обобщенных) собственных функций. При этом выбор с.с. гамильтониана из всех математически возможных является отдельной физической задачей. Отметим, что результаты, полученные в работе, не могут быть непосредственным образом использованы в безмассовом случае, так как области определения с.с. дираковских гамильтонианов для графена со щелью обращаются в нуль в безмассовом пределе (для графена с нулевой щелью). Поэтому случай графена с нулевой щелью требует отдельного исследования, которому и посвящена настоящая работа.

В данной работе мы рассматриваем задачу корректного определения дираковского гамильтониана как с.с. оператора для квазичастиц в графене без щели в присутствии кулоновской примеси с произвольным зарядом Z . Представлено рассмотрение всех аспектов этой задачи, основанное на теории с.с. расширений симметрических операторов [11–13]. Строится семейство всех возможных с.с. гамильтонианов, члены которого различаются параметрами соответствующих расширений (таким образом параметризуются ими), и проводится их спектральный анализ. Для этого строятся обобщенные собственные функции всех таких гамильтонианов, причем это делается для любых зарядов примеси. Технически задача сводится к анализу спектров соответствующих с.с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов. Показано, что спектры таких гамильтонианов являются непрерывными и занимают всю вещественную ось \mathbb{R} , в отличие от массивного случая, где имеется как дискретный, так и непрерывный спектр.

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены определения базовых понятий и соотношений, объясняющих постановку задачи. В разд. 3 описана математически строгая процедура сведения проблемы построения с.с. вращательно-инвариантного дираковского гамильтониана в полном гильбертовом пространстве к задаче построения с.с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов с определенным угловым моментом. Затем, в разд. 4, исследуется общее решение радиальных уравнений для безмассового уравнения Дирака в $2 + 1$ измерении. В разд. 5 строятся с.с. парциальные радиальные гамильтонианы с произ-

вольным допустимым значением углового момента j . Раздел 6 посвящен описанию особенностей полного гамильтониана рассматриваемой модели в зависимости от заряда примеси Z . В разд. 7 с помощью полученных результатов исследуется локальная плотность состояний в графене. Раздел 8 представляет собой краткое заключение.

2. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА В $2 + 1$ ИЗМЕРЕНИЯХ ДЛЯ БЕЗМАССОВОЙ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ

Мы работаем в рамках модели Дирака в $2 + 1$ измерении для заряженных квазичастиц в окрестности кулоновской примеси. Пусть в начале декартовой системы координат с осями x и y , лежащими в плоскости графена, находится кулоновская примесь с зарядом Z . Создаваемый ею потенциал с учетом макроскопической диэлектрической проницаемости ϵ имеет вид

$$V(\rho) = -\frac{Ze^2}{\epsilon} \frac{1}{\rho}, \quad \rho = |\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2}, \quad \mathbf{r} = (x, y).$$

Обозначим через \mathbf{K}_s точки Дирака, координаты которых в зоне Бриллюэна выбраны в виде $\mathbf{K}_s = (4\pi s/(3a), 0)$, где $a = 2.46 \text{ \AA}$ — постоянная решетки, а $s = \pm 1$ — изоспиновое квантовое число.

Полное гильбертово пространство \mathfrak{H}_{tot} квантовых состояний квазичастиц является прямой ортогональной суммой двух гильбертовых пространств \mathfrak{H}_s , $s = \pm 1$, каждое из которых связано с соответствующей точкой Дирака \mathbf{K}_s . Пространства \mathfrak{H}_s являются гильбертовыми пространствами двумерных дублетов, так что

$$\mathfrak{H}_{tot} = \mathfrak{H}_1 \oplus \mathfrak{H}_{-1}, \quad \mathfrak{H}_1 = \mathfrak{H}_{-1} = \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2).$$

В силу дальнедействующей природы кулоновского поля, междолинные процессы не учитываются и переходы между гильбертовыми пространствами \mathfrak{H}_s не рассматриваются. Так что полный эффективный гамильтониан \hat{H}_{tot} квазичастиц является прямой ортогональной суммой двух гамильтонианов $\hat{\mathcal{H}}_s$, $s = \pm 1$, каждый из которых действует в соответствующем гильбертовом пространстве \mathfrak{H}_s и может быть рассмотрен отдельно.

В рамках модели Дирака квазичастицы в окрестности каждой точки Дирака \mathbf{K}_s описываются эффективным безмассовым уравнением Дирака [14]:

$$\check{\mathcal{H}}_s \Psi_s = \mathcal{E} \Psi_s, \quad s = \pm 1, \quad (1)$$

где волновые функции Ψ_s являются дублетами, зависящими от \mathbf{r} , $\Psi_s = \Psi_s(\mathbf{r}) = \{\psi_{s\alpha}(\mathbf{r}), \alpha = 1, 2\}$, компоненты $\psi_{s\alpha}(\mathbf{r})$ представляют собой огибающие блоховских функций в двух подрешетках графена A и B соответственно, $\check{\mathcal{H}}_s$ — дифференциальные операции, отвечающие уравнению Дирака в 2 + 1 измерениях,

$$\check{\mathcal{H}}_s = \hbar v_F \left(-i [\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y] - \frac{g}{\rho} \right), \quad (2)$$

$$g = \frac{1}{\hbar v_F} \frac{Z e^2}{\epsilon} = \alpha_F \frac{Z}{\epsilon} = \alpha_F Z_{eff}, \quad Z_{eff} = \frac{Z}{\epsilon}.$$

Здесь $v_F \approx 10^6$ см/с — скорость Ферми и $\alpha_F = e^2/(\hbar v_F)$ — «постоянная тонкой структуры» в графене, $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ — матрицы Паули. Вводя обозначения $\hat{H}_s = (\hbar v_F)^{-1} \check{\mathcal{H}}_s$, $E = (\hbar v_F)^{-1} \mathcal{E}$, запишем уравнение (1) в следующем виде:

$$\hat{H}_s \Psi_s(\mathbf{r}) = E \Psi_s(\mathbf{r}), \quad s = \pm 1,$$

где дифференциальные операции \hat{H}_s в полярных координатах ρ, ϕ , ($x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$) имеют вид

$$\hat{H}_s = -i(s \cos \phi \sigma_x + \sin \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{i}{\rho} (s \sin \phi \sigma_x - \cos \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{g}{\rho}. \quad (3)$$

Для того чтобы придать физический смысл соответствующей квантовомеханической задаче на собственные значения, мы должны, отправляясь от дифференциальных операций \hat{H}_s , построить соответствующие гамильтонианы \hat{H}_s как с.с. операторы с определенными областями определения в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$. При решении этой задачи мы следуем идеям работы [10], в которой рассмотрена подобная задача для соответствующих массивных квазичастиц.

По определению переменная j принимает полуцелые, положительные и отрицательные, значения, $j = \pm(n+1/2)$, $n \in \mathbb{Z}_+$, тогда как переменная Z принимает неотрицательные целые значения, $Z \in \mathbb{Z}_+$. В дальнейшем нам будет удобнее рассматривать переменную Z как величину, принимающую непрерывные значения и лежащую на неотрицательной вертикальной полуоси, $Z \in \mathbb{R}_+$, а возвращаться к ее естественным целочисленным значениям в случае необходимости.

3. РЕДУКЦИЯ К РАДИАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ

Начнем с определения начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} в гильбертовом пространстве

$\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$, ассоциированных с соответствующими дифференциальными выражениями \hat{H}_s (3). Поскольку коэффициентные функции дифференциальных выражений \hat{H}_s являются гладкими вне начала координат, мы выбираем пространство гладких дублетов с компактным носителем для областей определения $D(\hat{H}_s^{in})$ операторов \hat{H}_s^{in} .

Чтобы обойти проблемы с сингулярностью кулоновского потенциала в начале координат, дополнительно потребуем обращения в нуль дублетов $D(\hat{H}_s^{in})$ в некоторой окрестности начала координат, в общем случае различной для каждого дублета. Заметим, что области определения $D(\hat{H}_s^{in})$ (которые совпадают для обоих значений s) плотны в \mathfrak{H} . Таким образом, операторы \hat{H}_s^{in} определяются как

$$\hat{H}_s^{in} = \left\{ \begin{array}{l} D(\hat{H}_s^{in}) = \{\Psi(\mathbf{r}) : \psi_\alpha(\mathbf{r}) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\})\}, \\ \hat{H}_s^{in} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}_s \Psi(\mathbf{r}). \end{array} \right.$$

Очевидно, что так определенный оператор \hat{H}_s^{in} является симметрическим.

Мы строим с.с. гамильтонианы \hat{H}_s как с.с. расширения соответствующих исходных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} . Мы требуем, чтобы операторы \hat{H}_s были вращательно-инвариантными, так же как исходные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} . Смысл этого требования выяснится ниже.

Существует два различных унитарных представления U_s группы вращений Spin(2) в \mathfrak{H} , которые связаны с соответствующими операторами \hat{H}_s^{in} . Генератор \hat{J}_s представления группы U_s , называемый оператором углового момента (их два), является с.с. оператором в \mathfrak{H} , определенным на абсолютно непрерывных и периодических по $\phi \in [0, 2\pi]$ дублетах и ассоциированным с дифференциальным выражением

$$\check{J}_s = -i \frac{\partial}{\partial \phi} + s \frac{\sigma_z}{2}.$$

Для каждого s гильбертово пространство \mathfrak{H} представляется в виде прямой ортогональной суммы подпространств \mathfrak{H}_{sj} , которые являются собственными пространствами оператора углового момента \hat{J}_s , соответствующими всем его собственным значениям j ,

$$\mathfrak{H} = \sum_j^\oplus \mathfrak{H}_{-1,j} = \sum_j^\oplus \mathfrak{H}_{+1,j}, \quad (4)$$

$$j = \pm 1/2, \pm 3/2 \dots$$

Подпространство \mathfrak{H}_{sj} с данными s и j состоит из дублетов Ψ_{sj} вида

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} e^{ij\phi} \begin{pmatrix} e^{-is\phi/2} f(\rho) \\ -ise^{is\phi/2} g(\rho) \end{pmatrix} \in \mathfrak{H}_{sj}, \quad (5)$$

являющихся собственными функциями оператора \hat{J}_s ,

$$\hat{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \check{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = j \Psi_{sj}(\mathbf{r}).$$

Отметим, что спектры операторов \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 совпадают. Функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ называются радиальными функциями. На физическом языке разложения (4) и (5) соответствуют разложению дублетов $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathfrak{H}$ по собственным функциям двух разных операторов углового момента \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 .

В дальнейшем для нас является существенным следующий факт. Пусть $L^2(\mathbb{R}_+)$ есть гильбертово пространство радиальных дублетов,

$$F(\rho) = \begin{pmatrix} f(\rho) \\ g(\rho) \end{pmatrix} \in L^2(\mathbb{R}_+),$$

со скалярным произведением

$$\begin{aligned} (F_1, F_2) &= \int_0^\infty F_1^+(\rho) F_2(\rho) d\rho = \\ &= \int_0^\infty [f_1(\rho) f_2(\rho) + g_1(\rho) g_2(\rho)] d\rho, \end{aligned}$$

так что $L^2(\mathbb{R}_+) = L^2(\mathbb{R}_+) \oplus L^2(\mathbb{R}_+)$. Тогда (5) и соотношение

$$\|\Psi_{sj}\|^2 = \int_0^\infty [|f(\rho)|^2 + |g(\rho)|^2] d\rho$$

означают, что пространство $\mathfrak{H}_{sj} \subset \mathfrak{H}$ унитарно эквивалентно гильбертовому пространству $L^2(\mathbb{R}_+)$,

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj} F(\rho), \quad F(\rho) = V_{sj}^{-1} \Psi_{sj}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Начальные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} являются вращательно-инвариантными. А именно, каждый оператор \hat{H}_s^{in} инвариантен относительно представления U_s группы вращений. Таким образом, каждое подпространство \mathfrak{H}_{sj} (собственное пространство генератора \hat{J}_s с собственным значением j) приводит оператор \hat{H}_s^{in} . Другими словами, оператор \hat{H}_s^{in} коммутирует с проекторами P_{sj} на подпространства \mathfrak{H}_{sj} , см. [15]. Это, в свою очередь, означает следующее. Пусть

$$\Psi_s(\mathbf{r}) = \sum_j \Psi_{sj}(\mathbf{r}) \in D(\hat{H}_s^{in}).$$

Тогда

$$\Psi_{sj} = P_{sj} \Psi_s \in D(\hat{H}_s^{in}), \quad \hat{H}_s^{in} \Psi_s = \sum_j \hat{H}_{sj}^{in} \Psi_{sj},$$

где операторы $\hat{H}_{sj}^{in} = P_{sj} \hat{H}_s^{in} P_{sj} = \hat{H}_s^{in} P_{sj}$ представляют собой так называемые части оператора \hat{H}_s^{in} , действующие в \mathfrak{H}_{sj} . Их правило действия дается дифференциальной операцией первого порядка по переменной ρ , которое будет приведено ниже. Итак, каждый начальный симметрический оператор \hat{H}_s^{in} является прямой ортогональной суммой своих частей,

$$\hat{H}_s^{in} = \sum_j \oplus \hat{H}_{sj}^{in},$$

так что исследование вращательно-инвариантного оператора \hat{H}_s^{in} сводится к изучению операторов \hat{H}_{sj}^{in} .

Каждый оператор \hat{H}_{sj}^{in} является симметрическим оператором, действующим в подпространстве \mathfrak{H}_{sj} . Очевидно, он индуцирует симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R}_+)$, который унитарно эквивалентен оператору \hat{H}_{sj}^{in} ,

$$\hat{h}_{in}(Z, j, s) F = V_{sj}^{-1} \hat{H}_{sj}^{in} \Psi_{sj}, \quad \Psi_{sj} = V_{sj} F.$$

Оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{h}_{in}(Z, j, s) &= \\ &= \begin{cases} D_{\hat{h}_{in}(Z, j, s)} = \mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+), \\ \hat{h}_{in}(Z, j, s) F(\rho) = \check{h}(Z, j, s) F(\rho), \end{cases} \quad (7) \end{aligned}$$

где $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+) = C_0^\infty(\mathbb{R}_+) \oplus C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$. Дифференциальную операцию $\check{h}(Z, j, s)$,

$$\begin{aligned} \check{h}(Z, j, s) &= -i\sigma_y \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho} \sigma_x - \frac{g}{\rho}, \\ \kappa &= -sj, \quad g = \alpha_F \epsilon^{-1} Z, \end{aligned} \quad (8)$$

будем называть парциальной радиальной дифференциальной операцией.

Построение с.с. вращательно-инвариантных гамильтонианов \hat{H}_s как с.с. расширений начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} сводится к построению с.с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}(Z, j, s)$ в $L^2(\mathbb{R}_+)$ как с.с. расширений начальных симметрических парциальных радиальных операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$. А именно, пусть операторы $\hat{h}(Z, j, s)$ являются такими расширениями. Они, очевидно, индуцируют с.с. расширения $\hat{H}_{sj} = V_{sj} \hat{h}(Z, j, s) V_{sj}^{-1}$ начальных симметрических операторов \hat{H}_{sj}^{in} в подпространствах \mathfrak{H}_{sj} . Тогда прямая ортогональная сумма парциальных операторов \hat{H}_{sj} ,

$$\hat{H}_s = \sum_j \oplus \hat{H}_{sj}, \quad (9)$$

представляет собой вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} . И любое с.с. вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} имеет структуру (9). Спектр гамильтониана \hat{H}_s дается объединением спектров парциальных радиальных гамильтонианов,

$$\text{spec } \hat{H}_s = \cup_j \text{spec } \hat{h}(Z, j, s),$$

а соответствующие собственные функции, связанные с \mathfrak{H}_{sj} , получаются из собственных функций операторов $\hat{h}(Z, j, s)$ в $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ с помощью преобразования V_{sj} , см. (6).

4. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Перейдем к общему решению системы двух линейных обыкновенных дифференциальных уравнений для функций $f(\rho)$ и $g(\rho)$,

$$\begin{aligned} \hat{h}(Z, j, s)F(\rho) &= WF(\rho), \\ F(\rho) &= \begin{pmatrix} f(\rho) \\ g(\rho) \end{pmatrix}, \quad W \in \mathbb{C}, \end{aligned} \tag{10}$$

которое необходимо при исследовании спектра и собственных функций парциальных радиальных гамильтонианов. Действительные значения W в дальнейшем будут обозначаться буквой E . Для наших целей достаточно рассмотреть значения W , принадлежащие верхней комплексной полуплоскости, $W = E + iy, y \geq 0$. Также нас будет интересовать предел $W \rightarrow E + i0$.

Система (10), записанная покомпонентно, имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}f(\rho) - \left(W + \frac{g}{\rho}\right)g(\rho) &= 0, \\ \frac{dg}{d\rho} - \frac{\kappa}{\rho}g(\rho) + \left(W + \frac{g}{\rho}\right)f(\rho) &= 0. \end{aligned} \tag{11}$$

Далее, мы называем уравнения (11) радиальными уравнениями. Приведем общее решение радиальных уравнений, следуя стандартной процедуре [12, 16]. Сделаем следующую замену функций и переменных:

$$\begin{aligned} f(\rho) &= z^\Upsilon e^{-z/2} [Q(z) + P(z)], \\ g(\rho) &= iz^\Upsilon e^{-z/2} [Q(z) - P(z)], \\ z &= -2iW\rho, \quad \Upsilon^2 = \kappa^2 - g^2. \end{aligned}$$

В новых переменных и для новых функций получим

$$\begin{aligned} z \frac{d^2 Q(z)}{dz^2} + (\beta - z) \frac{dQ(z)}{dz} - \alpha Q(z) &= 0, \\ P(z) &= -\frac{1}{\kappa} \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) Q(z), \\ \beta &= 1 + 2\Upsilon, \quad \alpha = \alpha_+, \quad \alpha_+ = \Upsilon - ig. \end{aligned} \tag{12}$$

Видно, что уравнение (12) для функции $Q(z)$ представляет собой известное конфлюэнтное гипергеометрическое уравнение. Пусть $\Upsilon \neq -n/2, n \in \mathbb{N}$. В этом случае общее решение конфлюэнтного гипергеометрического уравнения является линейной комбинацией стандартных гипергеометрических функций $\Phi(\alpha, \beta; z)$ и $\Psi(\alpha, \beta; z)$,

$$Q(z) = A\Phi(\alpha, \beta; z) + B\Psi(\alpha, \beta; z),$$

где A, B — произвольные постоянные, а

$$\begin{aligned} \Psi(\alpha, \beta; z) &= \frac{\Gamma(1 - \beta)}{\Gamma(\alpha - \beta + 1)} \Phi(\alpha, \beta; z) + \\ &+ \frac{\Gamma(\beta - 1)}{\Gamma(\alpha)} z^{1-\beta} \Phi(\alpha - \beta + 1, 2 - \beta; z). \end{aligned}$$

Используя соотношения

$$\begin{aligned} \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) \Phi(\alpha, \beta; z) &= \alpha \Phi(\alpha + 1, \beta; z), \\ \left(z \frac{d}{dz} + \alpha \right) \Psi(\alpha, \beta; z) &= \alpha(\alpha - \beta + 1) \Psi(\alpha + 1, \beta; z), \\ \alpha - \beta + 1 &= -\alpha_-, \quad \alpha_+ \alpha_- = \kappa^2, \\ \alpha_- &= \Upsilon + ig, \quad a = \frac{\alpha}{\kappa}, \end{aligned}$$

найдем общее решение системы (11) в виде

$$\begin{aligned} Q(z) &= \tilde{A}\Phi(\alpha, \beta; z) + B\Psi(\alpha, \beta; z), \\ P(z) &= -\tilde{A}a\Phi(\alpha + 1, \beta; z) + B\kappa\Psi(\alpha + 1, \beta; z). \end{aligned}$$

Как следует из равенств

$$\begin{aligned} \Phi(\alpha + 1, \beta; z) &= e^z \Phi(\beta - \alpha - 1, \beta; -z), \\ i \frac{1 + a}{1 - a} &= \frac{\kappa + \Upsilon}{g}, \end{aligned}$$

общее решение радиальных уравнений можно представить в следующей форме:

$$\begin{aligned} F(\rho, \Upsilon, W) &= AX(\rho, \Upsilon, W) + \\ &+ Bz^\Upsilon e^{-z/2} [\Psi(\alpha, \beta; z) \varrho_+ - \kappa \Psi(\alpha + 1, \beta; z) \varrho_-], \\ \varrho_\pm &= (\pm 1, i)^T, \quad \tilde{A} = \frac{(-2iW)^{-\Upsilon}}{1 - a} A, \end{aligned} \tag{13}$$

где введен дублет $X(\rho, \Upsilon, W)$,

$$X(\rho, \Upsilon, W) = z^\Upsilon \left[e^{-z/2} \Phi(\alpha, \beta; z) \varrho_+ + ae^{z/2} \Phi(\alpha + 1, \beta; z) \varrho_- \right] = \frac{1-a}{2} (-2iW\rho)^\Upsilon [\Phi_+(\rho, \Upsilon, W) + \Phi_-(\rho, \Upsilon, W) \Xi] d_+,$$

$$\Phi_+(\rho, \Upsilon, W) = e^{iW\rho} \Phi(\alpha, 1 + 2\Upsilon, -2iW\rho) + e^{-iW\rho} \Phi(\alpha_-, 1 + 2\Upsilon, 2iW\rho),$$

$$\Phi_-(\rho, \Upsilon, W) = \frac{1}{iW} [e^{iW\rho} \Phi(\alpha, 1 + 2\Upsilon, -2iW\rho) - e^{-iW\rho} \Phi(\alpha_-, 1 + 2\Upsilon, 2iW\rho)],$$

$$\Xi = \begin{pmatrix} 0 & W \\ -W & 0 \end{pmatrix}, \quad d_\pm = \left(1, \frac{\kappa \pm \Upsilon}{g} \right)^T.$$

В дальнейшем будем использовать некоторые частные решения радиальных уравнений, соответствующие определенному выбору констант A и B и параметра Υ .

Введем новую величину Υ_+ следующим образом:

$$\Upsilon_+ = \Upsilon_+(g, j) = \begin{cases} \gamma = \sqrt{\kappa^2 - g^2} \geq 0, & g \leq |\kappa|, \\ i\sigma = i\sqrt{g^2 - \kappa^2}, & \sigma > 0. \end{cases}$$

Эта величина как функция параметра g имеет нули в точках $g = g_c(j) = |\kappa| = |j|$. В случае $\Upsilon_+ \neq 0$ ($g \neq g_c(j)$) мы имеем два линейно независимых решения F_1 и F_2 , образующих фундаментальную систему решений системы (11),

$$F_1(\rho; W) = F(\rho, \Upsilon_+, W)|_{A=1, B=0} = \rho^{\Upsilon_+} d_+ + O(\rho^{\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0, \\ F_2(\rho; W) = F(\rho, -\Upsilon_+, W)|_{A=1, B=0} = \rho^{-\Upsilon_+} d_- + O(\rho^{-\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Заметим, что оба дублета F_1 и F_2 являются вещественными целыми функциями от W . Их вронскиан легко находится, $\text{Wr}(F_1, F_2) = -2\Upsilon_+ g^{-1}$. Если $\text{Im } W > 0$, то оба дублета $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ экспоненциально растут при $\rho \rightarrow \infty$. Для вещественных значений $W = E$ дублеты F_1 и F_2 могут быть записаны в терминах кулоновских функций [17],

$$\mathcal{F}_\alpha(\eta; r) = \frac{|\Gamma(\alpha + 1 + i\eta)|}{\Gamma(2\alpha + 2)} (2r)^\alpha r e^{-\pi\eta/2 - ir} \times \Phi(\alpha + 1 - i\eta, 2\alpha + 2, 2ir).$$

Для $\Upsilon_+ = \gamma$ имеем

$$F_1(\rho; E) = \frac{2\Gamma(2\gamma)e^{-\pi\tilde{g}/2}}{|\Gamma(\gamma - i\tilde{g})|} \times |2E|^{-\gamma} (u_+(\gamma)\mathcal{F}_{\gamma-1}(-\tilde{g}, |E|\rho) - \text{sgn}(sjE)u_-(\gamma)\mathcal{F}_\gamma(-\tilde{g}, |E|\rho)), \\ F_2(\rho; E) = F_1(\rho; E)|_{\gamma \rightarrow -\gamma}, \quad (14) \\ u_+(\Upsilon) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\Upsilon - sj}{g} \end{pmatrix}, \quad u_-(\Upsilon) = \begin{pmatrix} \frac{\Upsilon - sj}{g} \\ 1 \end{pmatrix}, \\ \tilde{g} = \text{sgn}(E)g.$$

При $\Upsilon_+ = i\sigma$, $\sigma > 0$ имеем другое представление:

$$F_1(\rho; E) = 2\Gamma(2i\sigma) \sqrt{\frac{(\sigma - \tilde{g}) \text{sh}(\sigma - \tilde{g})}{\pi}} \times e^{-\pi\tilde{g}/2} |2E|^{-i\sigma} \left[u_+(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma-1}(-\tilde{g}, |E|\rho) - \frac{sj}{\tilde{g} - \sigma} u_-(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma}(-\tilde{g}, |E|\rho) \right], \\ F_2(\rho; E) = \overline{F_1(\rho; E)}.$$

Еще одно полезное решение F_3 дается выражением (13) при $A = 0$, $\Upsilon = \Upsilon_+$ и специальном выборе параметра $B = B(W)$,

$$F_3(\rho; W) = B(W)z^\Upsilon e^{-z/2} [\Psi(\alpha, \beta; z)\varrho_+ - b_-\Psi(\alpha + 1, \beta; z)\varrho_-] = \Gamma(-2\Upsilon_+)F_1(\rho; W) - \frac{g\omega(W)}{2\Upsilon_+} F_2(\rho; W),$$

где

$$\omega(W) = -i \frac{\Gamma(1 + 2\Upsilon_+)\Gamma(-\alpha_-)}{a\Gamma(\alpha)[\kappa - \Upsilon_+]} \left(2e^{-i\pi/2} W \right)^{-2\Upsilon_+} = -\text{Wr}(F_1, F_3), \\ B(W) = \frac{1}{2} \Gamma(-\alpha_-) \left[1 + \frac{\kappa + \Upsilon_+}{ig} \right] \left(2e^{-i\pi/2} W \right)^{-\Upsilon_+}.$$

Если $\text{Im } W > 0$, то дублет $F_3(\rho; W)$ убывает экспоненциально при $\rho \rightarrow \infty$ (с точностью до некоторого полинома).

5. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ РАДИАЛЬНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ

Поскольку все возможные с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ ассоциируются с общим дифференциальным выражением $\hat{h}(Z, j, s)$ в (8), их определение сводится к указанию их области определения $D_{h(Z, j, s)} \subset \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Каждый оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ представляет собой с.с. расширение

начального симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в (7), определенного в пространстве $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ гладких дублетов с компактным носителем на полуоси \mathbb{R}_+ . В то же время каждый оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ есть с.с. сужение сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$, который действует на так называемой естественной области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\check{h}(Z, j, s)$, состоящей из дублетов $F(\rho) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$, абсолютно непрерывных в пространстве \mathbb{R}_+ , и таких, что

$$\check{h}(Z, j, s)F(\rho) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+),$$

$$D_{\hat{h}_{in}(Z, j, s)} \subset D_{\check{h}(Z, j, s)} \subseteq D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+).$$

Поскольку коэффициентные функции дифференциальной операции $\check{h}(Z, j, s)$ действительны, индексы дефекта исходного симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны, так что с.с. расширения $\hat{h}(Z, j, s)$ существуют для любых значений параметров Z и j .

Согласно работам [10, 12], с.с. расширения $\hat{h}(Z, j, s)$ оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ будем строить как с.с. сужения сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$, которые определяются некоторыми асимптотическими с.с. граничными условиями.

Оценим асимметрию оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ в терминах (асимптотических) граничных значений дублетов из его области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$. Для этого введем квадратичную форму асимметрии Δ_* для оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ соотношением

$$\Delta_*(F) =$$

$$= (F, \hat{h}_{in}^+ F) - (\hat{h}_{in}^+ F, F) = 2i \operatorname{Im} (F, \hat{h}_{in}^+ F) =$$

$$= \int_0^\infty F^+(\rho) (\check{h}F)(\rho) d\rho - \int_0^\infty (\check{h}F)^+(\rho) F(\rho) d\rho. \quad (15)$$

Форма (15) показывает, в какой мере оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ отклоняется от симметрического оператора. Если $\Delta_* \equiv 0$, то оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ является симметрическим и поэтому с.с. оператором. Тогда $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ является существенно с.с. оператором и его единственным с.с. расширением является сопряженный ему оператор $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$. Если $\Delta_* \neq 0$, то с.с. оператор $\hat{h}(Z, j, s)$ находится как сужение оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$ на область $D_{\check{h}(Z, j, s)} \subseteq D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$, такую, что сужение формы Δ_* на $D_{\check{h}(Z, j, s)}$ равно нулю, и область $D_{\check{h}(Z, j, s)}$ нельзя расширить с сохранением условия $\Delta_* \equiv 0$.

При помощи интегрирования по частям в правой части (15) и с учетом (8) легко увидеть, что форма асимметрии Δ_* задается выражением

$$\Delta_*(F) = [F](\infty) - [F](0), \quad [F](\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} [F](\rho),$$

$$[F](0) = \lim_{\rho \rightarrow 0} [F](\rho),$$

$$[F](\rho) = -iF^+(\rho)\sigma_y F(\rho) = -\left[\overline{f(\rho)}g(\rho) - \overline{g(\rho)}f(\rho)\right].$$

Из квадратичной интегрируемости дублета $\check{h}(Z, j, s)F$ для $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ следует квадратичная интегрируемость производной $F'(\rho)$ на бесконечности. Отсюда следует, что любой дублет $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ убывает на бесконечности, $[F](\infty) = 0$, и форма асимметрии Δ_* определяется поведением данных дублетов в нуле:

$$\Delta_*(F) = -[F](0) =$$

$$= \lim_{\rho \rightarrow 0} \left(\overline{f(\rho)}g(\rho) - \overline{g(\rho)}f(\rho)\right). \quad (16)$$

Для вычисления формы асимметрии (16) нам необходимо иметь явный вид дублетов F из области определения $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$. В связи с этим заметим, что данные дублеты можно рассматривать как квадратично интегрируемые решения неоднородного дифференциального уравнения $\check{h}(Z, j, s)F(\rho) = G(\rho)$ с правой частью G , принадлежащей $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Любое решение данного неоднородного дифференциального уравнения может быть представлено в виде

$$F(\rho) = c_1 u_1(\rho) + c_2 u_2(\rho) + I_1(\rho) + I_2(\rho),$$

$$c_1, c_2 = \text{const},$$

$$u_1(\rho) = d_+ \rho^{\Upsilon_+},$$

$$u_2(\rho) = \begin{cases} d_- \rho^{-\Upsilon_+}, & g \neq g_c(j), \\ d_0(\rho), & g = g_c(j), \end{cases}$$

$$\check{h}(Z, j, s)u_k(\rho) = 0, \quad (17)$$

$$d_\pm = \begin{pmatrix} 1 \\ (\kappa \pm \Upsilon_+)/g \end{pmatrix},$$

$$d_0(\rho) = \begin{pmatrix} \ln \rho - \zeta(j, s)g_c^{-1}(j) \\ \zeta(j, s) \ln \rho \end{pmatrix},$$

$$\zeta(j, s) = \operatorname{sgn}(\kappa) = -s \operatorname{sgn}(j),$$

где $I_1(\rho)$ и $I_2(\rho)$ — частные решения неоднородного уравнения,

$$I_1(\rho) = \begin{cases} \frac{g}{2\Upsilon_+} \int_{\rho}^{\rho_0} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = \Upsilon_+ \geq 1/2, \quad \rho_0 > 0, \\ -\frac{g}{2\Upsilon_+} \int_0^{\rho} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = \Upsilon_+ < 1/2, \quad \Upsilon = i\sigma, \quad \sigma > 0, \\ g_c(j) \int_0^{\rho} [u_1(\rho) \otimes u_2(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = 0, \end{cases} \quad (18)$$

$$I_2(\rho) = \begin{cases} \frac{g}{2\Upsilon_+} \int_{\rho}^0 [u_2(\rho) \otimes u_1(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon \neq 0, \\ -g_c(j) \int_0^{\rho} [u_2(\rho) \otimes u_1(\rho')] G(\rho') d\rho', & \Upsilon = 0. \end{cases}$$

Выражения (17) и (18) позволяют найти асимптотическое поведение дублетов в нуле и вычислить форму асимметрии (16). Из (17) и (18) следует, что поведение дублетов F в нуле существенным образом зависит от значений параметров j и Z .

Удобно разбить верхнюю полуплоскость (j, Z) на так называемую несингулярную и сингулярную области, в которых проблема нахождения с.с. расширений $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ имеет принципиально разные решения. Эти области разделяются симметричной сингулярной кривой $Z = Z_s(j)$, где $Z_s(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon \sqrt{j^2 - 1/4}$, на которой $g = g_s(j) = \sqrt{j^2 - 1/4}$ и $\Upsilon_+ = \gamma = 1/2$. Несингулярная область определяется неравенством $Z \leq Z_s(j)$, что эквивалентно неравенству $\Upsilon_+ = \gamma \geq 1/2$. Сингулярная область определяется неравенством $Z > Z_s(j)$, что равносильно соотношению $0 \leq \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$ или $\Upsilon_+ = i\sigma, \sigma > 0$. Так как сингулярная кривая является верхней границей несингулярной области, значение $Z_s(j)$ будем называть максимальным несингулярным значением Z для данного j .

Мы делим сингулярную область на три подмножества: субкритическую, критическую и сверхкритическую. Субкритическая область определяется неравенствами $Z_s(j) < Z < Z_c(j)$, что эквивалентно $0 < \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$, где $Z_c(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon |j|$. Значение $Z_c(j)$ будем называть критическим значением Z для данного j . Критическая область представляет собой критическую кривую $Z = Z_c(j)$, что равносильно $g = g_c(j) = |j|$ или $\Upsilon_+ = \gamma = 0$. Сверхкритическая область определяется неравенством $Z > Z_c(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon |j|$, которое эквивалентно тому, что $\Upsilon_+ = i\sigma$, где $\sigma = \sqrt{g^2 - j^2} > 0$.

Далее, будем строить с.с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ как с.с. расширения оператора

$\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в каждой из четырех областей изменения заряда примеси Z .

5.1. Несингулярная область

Вычислим форму асимметрии (16) для несингулярной области $Z \leq Z_s(j), \Upsilon_+ = \gamma \geq 1/2$. Для интегралов (18) справедлива оценка

$$I_1(\rho) = O(\rho^{1/2}), \quad I_2(\rho) = O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (19)$$

Из (17) следует, что функция $u_2(\rho) \sim \rho^\gamma$ квадратично интегрируема в начале координат, а функция $u_2(\rho) \sim \rho^{-\gamma}$ не является квадратично интегрируемой. Дублеты $F \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ определяются выражением (17) с $c_2 = 0$ и ведут себя как $O(\rho^{1/2})$ при $\rho \rightarrow 0$. Тогда форма асимметрии равна нулю во всей области $D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$.

Отсюда следует, что в несингулярной области каждый парциальный радиальный гамильтониан определяется единственным образом, $\hat{h}_1(Z, j, s) = \hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$. Здесь нижний индекс «1» используется как символ несингулярной области (нижние индексы «2», «3», «4» вместе с другими соответствующими индексами будут относиться к определенным подобластям сингулярной области).

Другими словами, начальный симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ является существенно с.с. оператором, так как его индексы дефекта равны $(0, 0)$, а область определения оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$ является естественной областью определения для $\hat{h}(Z, j, s)$, $D_{h_1(Z, j, s)} = D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$.

Проведем спектральный анализ с.с. оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$. Построим функцию Грина данного оператора:

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes F_1(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ F_1(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho'. \end{cases}$$

В качестве дублета, определяющего направляющий функционал, выберем вещественно-целый дублет $U_1(\rho; W) = F_1(\rho; W)$. Так же как и в массивном случае, можно показать, что данный направляющий функционал является простым (см. [12]). Производная $\sigma'(E)$ спектральной функции связана с функцией Грина и простым направляющим функционалом $U_1(\rho; W)$ соотношением

$$U_1(c; E) \otimes U_1(c; E) \sigma'(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} G(c-0, c+0; E+i0),$$

где c — произвольная точка в интервале $(0; \infty)$.

Случай полуцелых значений параметра $\gamma = \ell/2$, $\ell \in \mathbb{N}$, требует дополнительного исследования, так как дублет $F_2(\rho; W)$ имеет сингулярность вида $\Gamma(-2\gamma)$ в точке $\gamma = \ell/2$,

$$\lim_{\gamma \rightarrow \ell/2} \frac{F_2(\rho; W)}{\Gamma(-2\gamma)} = -a_\ell(W) F_1(\rho; W)|_{\gamma=\ell/2},$$

$$a_\ell(W) = 2\gamma \left[g \omega(W)|_{\gamma=\ell/2} \right]^{-1},$$

где функция $a_\ell(W)$ представляет собой полином по W с вещественными коэффициентами:

$$a_\ell(W) = \frac{2^\ell \pi \gamma}{g \ell!} \left(2 - \frac{\ell}{\kappa} \right) \times \frac{e^{-\pi g} - (-1)^\ell e^{\pi g}}{[(-1)^\ell - \operatorname{ch}(2\pi g)] |\Gamma(ig - \ell/2)|^2} W^\ell.$$

В окрестности $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$, $\ell \in \mathbb{N}$, точки $\gamma = \ell/2$ дублет $F_2(\rho; W)$ может быть представлен в виде

$$F_2(\rho; W) = -a_\ell(W) \Gamma(-2\gamma) F_1(\rho; W) + U_\ell(\rho; W), \quad (20)$$

где дублет $U_\ell(\rho; W)$ является вещественно-целым, имеет конечный предел при $\gamma \rightarrow \ell/2$ и удовлетворяет радиальным уравнениям (11). Из (20) следует, что

$$U_\ell(\rho; W) = d_- \rho^{-\gamma} + O(\rho^{1-\gamma})$$

при $\rho \rightarrow 0$.

Так как дублеты $F_1(\rho; W)$ и $U_\ell(\rho; W)$ линейно независимы, $\operatorname{Wr}(F_1, U_\ell) = -2\gamma/g \neq 0$, то в окрестности $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$ точки $\gamma = \ell/2$ дублет $F_3(\rho; W)$ допускает разложение:

$$F_3(\rho; W) = \omega(W) \left[A_\ell(W) F_1(\rho; W) + \frac{g}{2\gamma} U_\ell(\rho; W) \right],$$

$$A_\ell(W) = \Gamma(-2\gamma) \left[\omega^{-1}(W) - \omega^{-1}(W) \Big|_{\gamma=\ell/2} \right].$$

Тогда для $\ell - 1 < 2\gamma < \ell + 1$ имеем

$$G(c-0, c+0, E+i0) = A_\ell(E+i0) F_1(c; E) \otimes F_1(c; E) + \frac{g}{2\gamma} F_1(c; E) \otimes U_\ell(c; E).$$

В силу действительности дублетов $F_1(c; E)$ и $U_\ell(c; E)$ производная спектральная функция представима следующим образом:

$$\sigma'_1(E) = \pi^{-1} \operatorname{Im} A_\ell(E+i0).$$

Заметим, что функция $A_\ell(E+i0)$ непрерывна по γ в точке $\gamma = \ell/2$. Поэтому мы можем положить

$$\sigma'_1(E)|_{\gamma=\ell/2} = \lim_{\gamma \rightarrow \ell/2} \sigma'_1(E)|_{\gamma \neq \ell/2},$$

$$\sigma'_1(E)|_{\gamma \neq \ell/2} = \pi^{-1} \Gamma(-2\gamma) \operatorname{Im} \omega^{-1}(E+i0).$$

В тех точках, в которых $\omega(E+i0)$ отлична от нуля, спектральная функция имеет вид

$$\sigma'_1(E) = \pi^{-1} \Gamma(-2\gamma) \operatorname{Im} \omega^{-1}(E) = \left[\frac{|2E|^\gamma}{|\Gamma(ig - \gamma)| |\Gamma(2\gamma + 1)|} \right]^2 \times \frac{\pi(\kappa - \gamma) e^{\operatorname{sgn}(E)\pi g}}{\kappa (\operatorname{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma))} > 0.$$

Так как функция $\omega(E)$ отлична от нуля для всех E , непрерывна на $(-\infty, 0) \cup (0; \infty)$ и принимает комплексные значения, то значения $E \in (-\infty, \infty)$ являются точками непрерывного спектра оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$. В данных точках спектра функция $\sigma'_1(E)$ положительна, $\sigma'_1(E) = Q_1^2(E) > 0$, где $Q_1(E) = \sqrt{\sigma'_1(E)}$ — нормировочный множитель для соответствующей (обобщенной) собственной функции $U_1(\rho; E)$ непрерывного спектра.

Таким образом, спектр каждого парциального радиального гамильтониана $\hat{h}_1(Z, j, s)$ в несингулярной области является простым (невыврожденным) и состоит только из непрерывного спектра,

$$\operatorname{spec} \hat{h}_1(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Ортонормированные (обобщенные) собственные функции $U_{1E}(\rho)$, $|E| \geq 0$ непрерывного спектра, отвечающие парциальным радиальным гамильтонианам $\hat{h}_1(Z, j, s)$, образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения (см. [12]) и имеют вид

$$\begin{aligned}
 U_{1E}(\rho) &= Q_1(E)F_1(\rho; E), \quad Q_1(E) = \sqrt{\sigma_1'(E)} = \\
 &= \frac{|2E|^\gamma e^{\text{sgn}(E)\pi g/2}}{|\Gamma(ig - \gamma)| \Gamma(2\gamma + 1)} \times \\
 &\quad \times \sqrt{\frac{\pi(\kappa - \gamma)}{\kappa [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]}}. \quad (21)
 \end{aligned}$$

5.2. Субкритическая область

В субкритической области изменения заряда, $Z_s(j) < Z < Z_c(j)$, выполняется соотношение $0 < \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$. Здесь для интегралов (18) остается справедливой оценка (19). Так как функции $u_1(\rho) \sim \rho^\gamma$ и $u_2(\rho) \sim \rho^{-\gamma}$ квадратично интегрируемы в начале координат для $\gamma < 1/2$, то для дублетов $F \in D_{h(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ имеем

$$F(\rho) = c_1\rho^\gamma + c_2\rho^{-\gamma} + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (22)$$

Отсюда следует, что форма асимметрии является нетривиальной антиэрмитовой квадратичной формой по коэффициентам асимптотики (22):

$$\Delta_*(F) = \frac{2\gamma}{g} (\bar{c}_2c_1 - \bar{c}_1c_2).$$

Это означает, что индексы дефекта оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны (1, 1) и существует семейство с.с. расширений $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ данного оператора, которые параметризуются параметром $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, и характеризуются с.с. граничными условиями в начале координат,

$$F(\rho) = c[\rho^\gamma d_+ \cos \nu + \rho^{-\gamma} d_- \sin \nu] + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0, \quad (23)$$

где c — произвольное комплексное число. Таким образом, область определения $D_{h_{2,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$\begin{aligned}
 D_{h_{2,\nu}(Z,j,s)} &= \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{h(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+), \right. \\
 &\quad \left. F \text{ удовлетворяет (23)} \right\}.
 \end{aligned}$$

Обратимся к спектральному анализу с.с. операторов $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$. В качестве дублета, определяю-

щего простой направляющий функционал, выберем вещественно-целый дублет

$$U_{2,\nu}(\rho; W) = F_1(\rho; W) \cos \nu + F_2(\rho; W) \sin \nu.$$

Построим соответствующую функцию Грина:

$$\begin{aligned}
 G(\rho, \rho'; W) &= \\
 &= \omega_1^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes U_{2,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{2,\nu}(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_1(W) &= -\text{Wr}(F_1, F_3) = \\
 &= \omega(W) \cos \nu + g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \sin \nu,
 \end{aligned}$$

а дублет $F_3(\rho; W)$ запишем в форме

$$\begin{aligned}
 F_3(\rho; W) &= \frac{g}{2\gamma} \left[\tilde{\omega}_1 U_{2,\nu}(\rho; W) + \omega_1 \tilde{U}_{2,\nu}(\rho; W) \right], \\
 \tilde{U}_{2,\nu}(\rho; W) &= -F_1(\rho; W) \sin \nu + F_2(\rho; W) \cos \nu, \\
 \tilde{\omega}_1(W) &= \omega(W) \sin \nu - g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \cos \nu.
 \end{aligned}$$

Тогда

$$\begin{aligned}
 G(c - 0, c + 0, E + i0) &= \\
 &= \omega_{2,\nu}^{-1}(E + i0) U_{2,\nu}(c; E) \otimes U_{2,\nu}(c; E) + \\
 &\quad + \frac{g}{2\gamma} U_{2,\nu}(c; E) \otimes \tilde{U}_{2,\nu}(c; E),
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \omega_2(W) &= \frac{2\gamma\omega_1(W)}{g\tilde{\omega}_1(W)} = \\
 &= \frac{2\gamma}{g} \frac{\omega(W) \cos \nu + g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \sin \nu}{\omega(W) \sin \nu - g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \cos \nu}.
 \end{aligned}$$

Дублеты $U_{2,\nu}(\rho; E)$ и $\tilde{U}_{2,\nu}(\rho; E)$ действительны и производная $\sigma'_{2,\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{2,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{2,\nu}(E + i0)}.$$

Функция $\omega_2(E)$ непрерывна, отлична от нуля и $\omega_{2,\nu}(E + i0) = \omega_{2,\nu}(E)$. Тогда для производной спектральной функции имеем выражение

$$\sigma'_{2,\nu}(E) = \frac{A(E) [\text{ctg}(\pi g) + \delta \text{sh}(\pi g)] \sin(2\pi\gamma)}{[\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)] \cos \nu + A^2(E)(\pi\gamma/g)^2(1 - \cos(2\nu)) + B_\delta A(E) \text{ch}(2\nu)},$$

$$A(E) = \frac{\kappa - \gamma}{2\gamma\kappa} |\Gamma(ig - \gamma)|^2 \frac{\Gamma(1 - 2\gamma)}{\Gamma(1 + 2\gamma)} |2E|^{2\gamma}, \quad \delta = \text{sgn}(E),$$

$$B_\delta = \frac{4\pi\gamma}{g} [\cos^2(\pi\gamma) \text{sh}(\pi g) - \delta \sin^2(\pi\gamma) \text{ch}(\pi g)].$$

Функция $\sigma'_{2,\nu}(E)$ непрерывна и, следовательно, спектр оператора $\hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s)$ является непрерывным и простым,

$$\text{спес } \hat{h}_{2,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

В итоге нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{2,\nu}(\rho)$, соответствующие непрерывному спектру и дающиеся выражениями

$$\begin{aligned} U_{2,\nu,E}(\rho) &= Q_{2,\nu}(E)U_{2,\nu}(\rho; E) = \\ &= Q_{2,\nu}(E) [F_1(\rho; E) \cos \nu + F_2(\rho; E) \sin \nu], \quad (24) \\ Q_{2,\nu}(E) &= \sqrt{\sigma'_{2,\nu}(E)}, \end{aligned}$$

образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

5.3. Критическая область

Критическая область определяется критической кривой $Z = Z_c(j)$, на которой $g = g_c(j)$ и $\Upsilon_+ = \gamma = 0$. Отметим, что в данной области физические значения пар j (полуцелое число) и Z (целое число) лежат на критической кривой для очень специальных значений «постоянной тонкой структуры» в графене, α_F/ϵ , $\alpha_F/\epsilon = |j|/Z$. В частности, если α_F/ϵ — иррациональное число, никакая физическая пара (j, Z) не лежит на критической кривой.

В этой области асимптотическое поведение дублетов $F \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ дается формулами (17) с учетом того, что

$$I_1(\rho) = O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad I_2(\rho) = O(\rho^{1/2} \ln \rho),$$

при $\gamma = 0, \rho \rightarrow 0$:

$$F(\rho) = c_1 d_+ + c_2 d_0(\rho) + O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Отсюда для формы асимметрии получаем

$$\Delta_*(F) = g_c^{-1}(j) (\overline{c_1} c_2 - \overline{c_2} c_1).$$

Следовательно, в этой области также имеется однопараметрическое семейство с.с. расширений $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$, $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, которые задаются асимптотическими с.с. граничными условиями

$$\begin{aligned} F(\rho) &= c[d_0(\rho) \cos \nu + d_+ \sin \nu] + \\ &+ O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0, \quad (25) \end{aligned}$$

где постоянный дублет $d_+ = d_+|_{\gamma=0} = (1, \zeta)^T$ и дублет $d_0(\rho)$, зависящий от ρ , определяется в (17).

Таким образом, область определения $D_{\hat{h}_{3,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$\begin{aligned} D_{\hat{h}_{3,\nu}(Z,j,s)} &= \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+), \right. \\ &\left. F \text{ удовлетворяет (25)} \right\}. \end{aligned}$$

Отметим, что в случае $\Upsilon_+ = \gamma = 0$ дублеты F_1 и F_2 совпадают. Поэтому в качестве двух линейно независимых решений радиальных уравнений (11) при $\gamma = 0$ выберем два линейно независимых вещественно-целых решения $F_1^{(0)}(\rho; W)$, $F_2^{(0)}(\rho; W)$ и их линейную комбинацию $F_3^{(0)}$. А именно:

$$\begin{aligned} F_1^{(0)}(\rho; W) &= F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} = d_+ + O(\rho), \quad \rho \rightarrow 0, \\ F_2^{(0)}(\rho; W) &= \partial_\gamma F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} - \frac{\zeta(j, s)}{g_c(j)} F_1^{(0)}(\rho; W) = \\ &= d_0(\rho) + O(\rho \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Соответствующий вронскиан имеет вид

$$\text{Wr}(F_1^{(0)}, F_2^{(0)}) = g_c^{-1}(j).$$

В качестве аналога дублета $F_3(\rho; W)$ при $\gamma = 0$ возьмем дублет

$$\begin{aligned} F_3^{(0)}(\rho; W) &= -\lim_{\gamma \rightarrow 0} F_3(\rho; W) = \\ &= F_2^{(0)}(\rho; W) + f(W)F_1^{(0)}(\rho; W), \end{aligned}$$

где

$$f(W) = g_c(j)\omega^{(0)}(W),$$

$$\begin{aligned} \omega^{(0)}(W) &= -\text{Wr}(F_2^{(0)}, F_3^{(0)}) = \\ &= g_c^{-1}(j) \left[\ln \left(2e^{-i\pi/2} W \right) + \right. \\ &\left. + \frac{\zeta(j, s) + i}{2g_c(j)} + \psi(-ig_c(j)) - 2\psi(1) \right], \end{aligned}$$

$$\psi(x) = \frac{\Gamma'(x)}{\Gamma(x)}.$$

Спектральный анализ операторов $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ проводится аналогично случаю субкритической области и мы представим здесь только его окончательные результаты. В качестве дублета, определяющего простой направляющий функционал, выберем величину

$$U_{3,\nu}(W) = F_1^{(0)}(\rho, W) \sin \nu + F_2^{(0)}(\rho, W) \cos \nu,$$

которая является вещественно-целой по W и удовлетворяет с.с. асимптотическим граничным условиям (25). Функция Грина оператора $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ дается выражением

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega_3^{-1}(W) \begin{cases} F_3^{(0)}(\rho; W) \otimes U_{3,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{3,\nu}(\rho; W) \otimes F_3^{(0)}(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}$$

$$\omega_3(W) = -\text{Wr}(U_{3,\nu}, F_3^{(0)}) = g_c^{-1}(j) [f(W) \cos \nu - \sin \nu].$$

Тогда

$$G(c-0, c+0, E+i0) = \omega_{3,\nu}^{-1}(E+i0) U_{3,\nu}(c; E) \otimes U_{3,\nu}(c; E) + g_c(j) U_{3,\nu}(c; E) \otimes \tilde{U}_{3,\nu}(c; E),$$

$$\omega_{3,\nu}(W) = g_c^{-1}(j) \frac{f(W) \cos \nu - \sin \nu}{f(W) \sin \nu + \cos \nu},$$

$$\tilde{U}_{3,\nu}(\rho; W) = F_1^{(0)}(\rho, W) \cos \nu - F_2^{(0)}(\rho, W) \sin \nu.$$

Производная $\sigma'_{3,\nu}(E)$ этой спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{3,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{3,\nu}(E+i0)}.$$

Базисная функция $\omega_{3,\nu}(E)$ отлична от нуля для всех E , непрерывна и принимает комплексные значения. Следовательно,

$$\sigma'_{3,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega_{3,\nu}(E)} = -\frac{g_c(j) B_\delta / \pi}{(A_\zeta^2 + B_\delta^2) \cos^2 \nu - A_\zeta \sin(2\nu) + \sin^2 \nu},$$

$$A_\zeta = \text{Re} f(W) = -2\psi(1) + \zeta(j, s) g_c^{-1}(j) / 2 + \ln |2E| + \text{Re} \psi(-ig_c(j)),$$

$$B_\delta = \text{Im} f(W) = (g_c^{-1}(j) - \pi) \frac{\delta}{2} + \text{Im} \psi(-ig_c(j)), \quad \delta = \text{sgn}(E).$$

Простой спектр гамильтониана $\hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s)$ дается выражением

$$\text{спес } \hat{h}_{3,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{3,\nu}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, имеют вид

$$U_{3,\nu,E}(\rho) = Q_{3,\nu}(E) U_{3,\nu}(\rho; E) = Q_{3,\nu}(E) [F_1^{(0)}(\rho; E) \cos \nu + F_2^{(0)}(\rho; E) \sin \nu], \quad (26)$$

$$Q_{3,\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{3,\nu}(E)},$$

и образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

5.4. Сверхкритическая область

Сверхкритическая область определяется условиями $Z > Z_c(j)$ и $\Upsilon_+ = i\sigma$, где $\sigma = \sqrt{g^2 - j^2} > 0$. В этой области асимптотическое поведение дублетов $F \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ определяется выражением (17), где $I_1(\rho) = O(\rho^{1/2})$, $I_2(\rho) = O(\rho^{1/2})$, при $\rho \rightarrow 0$:

$$F(\rho) = c_1 \rho^{i\sigma} d_+ + c_2 \rho^{-i\sigma} d_- + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0.$$

Для формы асимметрии получаем

$$\Delta_*(F) = 2i\sigma g^{-1} (|c_1|^2 - |c_2|^2).$$

В этой области мы снова имеем однопараметрическое семейство с.с. расширений $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$, $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$, которые задаются асимптотическими с.с. граничными условиями:

$$F(\rho) = c[ie^{i\nu} \rho^{i\sigma} d_+ - ie^{-i\nu} \rho^{-i\sigma} d_-] + O(\rho^{1/2}), \quad \rho \rightarrow 0. \quad (27)$$

Отсюда следует, что область определения $D_{h_{4,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ имеет вид

$$D_{h_{4,\nu}(Z,j,s)} = \left\{ F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+) \text{ и } F \text{ удовлетворяет (27)} \right\}.$$

Спектральный анализ операторов $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ проводится аналогично предыдущим случаям, представляем здесь только окончательные результаты. В качестве дублета, определяющего простой направляющий функционал, выберем

$$U_{4,\nu}(\rho; W) = ie^{i\nu} F_1(\rho, W) \sin \nu - ie^{-i\nu} F_2(\rho, W),$$

который является вещественно-целым по W и удовлетворяет с.с. асимптотическим граничным условиям (27). Функция Грина оператора $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ определяется выражением

$$G(\rho, \rho'; W) = \omega_4^{-1}(W) \begin{cases} F_3(\rho; W) \otimes U_{4,\nu}(\rho'; W), & \rho > \rho', \\ U_{4,\nu}(\rho; W) \otimes F_3(\rho'; W), & \rho < \rho', \end{cases}$$

$$\omega_4(W) = -\text{Wr}(U_{4,\nu}, F_3) = -ie^{-i\nu} \frac{\Gamma(1-2i\sigma)}{g} \left[1 - \frac{g\omega(W)}{\Gamma(1-2i\sigma)} e^{2i\nu} \right],$$

из которого следует

$$\begin{aligned}
 G(c-0, c+0, E+i0) &= \\
 &= \omega_{4,\nu}^{-1}(E+i0)U_{4,\nu}(c;E) \otimes U_{4,\nu}(c;E) - \\
 &\quad - \frac{g}{4\sigma}U_{4,\nu}(c;E) \otimes \tilde{U}_{4,\nu}(c;E), \\
 \omega_{4,\nu}(W) &= -4i\sigma g^{-1} \frac{1 - e^{2i\nu}g\omega(W)/\Gamma(1-2i\sigma)}{1 + e^{2i\nu}g\omega(W)/\Gamma(1-2i\sigma)}, \\
 \tilde{U}_{4,\nu}(\rho;W) &= e^{i\nu}F_1(\rho,W) + e^{-i\nu}F_2(\rho,W).
 \end{aligned}$$

Производная $\sigma'_{4,\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

$$\sigma'_{4,\nu}(E) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega_{4,\nu}(E+i0)}.$$

Базисная функция $\omega_{4,\nu}(E)$ отлична от нуля, непрерывна и принимает комплексные значения. Тогда

$$\begin{aligned}
 \sigma'_{4,\nu}(E) &= \frac{1}{\pi} \operatorname{Im} \frac{1}{\omega_{4,\nu}(E)} = -\frac{\delta}{4\sigma} \frac{A_-}{A_+ + B_s(\nu;E)}, \\
 A_{\pm} &= \frac{\pi g^2}{4\sigma j} [\operatorname{sh}^{-1}(\pi\sigma) - \operatorname{ch}^{-1}(\pi\sigma)] \times \\
 &\quad \times \{e^{2\pi\sigma} \operatorname{sh}^{-1}(\pi[g - \delta\sigma]) \pm \operatorname{sh}^{-1}(\pi[g + \delta\sigma])\}, \\
 B_s(\nu;E) &= 2 \operatorname{Re} \{(j + i\sigma)\Gamma(-i(g - \sigma))\Gamma(i(g + \sigma))\} \times \\
 &\quad \times \Gamma^2(-2i\sigma) \exp(2i\sigma \ln|2E| - 2i\nu), \\
 \delta &= \operatorname{sgn}(E).
 \end{aligned}$$

Спектр гамильтониана $\hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s)$ является простым и задается выражением

$$\operatorname{спес} \hat{h}_{4,\nu}(Z, j, s) = (-\infty, \infty).$$

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{4,\nu}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, имеют вид

$$\begin{aligned}
 U_{4,\nu}(\rho) &= Q_{4,\nu}(E)U_{4,\nu}(\rho;E) = \\
 &= iQ_{4,\nu}(E) [e^{i\nu}F_1(\rho,W) - e^{-i\nu}F_2(\rho,W)], \quad (28) \\
 Q_{4,\nu}(E) &= \sqrt{\sigma'_{4,\nu}(E)}.
 \end{aligned}$$

Они образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения.

6. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ ПОЛНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ

В разд. 5.1–5.4 мы построили все с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ для всех значений заряда Z как с.с. расширения исходных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ для любых значений j и s и исследовали спектральные задачи для этих гамильтонианов.

Было показано, что в сингулярной области изменения заряда примеси с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ как с.с. расширения начальных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ не определены однозначно для каждой тройки параметров Z, j и s . Поскольку индексы дефекта m_+, m_- каждого симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны (1, 1) и, следовательно, существует однопараметрическое семейство расширений, такое семейство параметризуется параметром $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$. Парциальные радиальные гамильтонианы с одинаковыми значениями Z, j и s , но с разными значениями ν , ассоциированы с одним и тем же дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$, но различаются своими областями определения, которые являются подмножествами естественной области определения $D_{\check{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\check{h}(Z, j, s)$ и задаются некоторыми асимптотическими граничными условиями в начале координат, содержащими явно параметр ν .

Как и в массивном случае [10] и трехмерной кулоновской задаче [12], сингулярная область делится на три подмножества, которые отличаются характером асимптотических с.с. граничных условий в начале координат. Во всех трех подобластях сингулярной области для каждого оператора $\hat{h}_{k,\nu}$ существует простой направляющий функционал. Отсюда следует, что спектр оператора $\hat{h}_{k,\nu}$ является простым (невыврожденным в физической терминологии). В таком случае основным инструментом спектрального анализа является спектральная функция $\sigma_{k,\nu}(E)$ и ее (обобщенная) производная $\sigma'_{k,\nu}(E)$, где $E, E \in \mathbb{R}$, — вещественная переменная.

Формула (9) позволяет нам восстановить все с.с. операторы \hat{H}_s , ассоциированные с дифференциальным выражением (3) для любого значения параметра g , а также описать решение соответствующих спектральных задач для всех гамильтонианов \hat{H}_s .

Введем согласно работе [10] множества значений заряда, для которых спектральная задача описывается похожим образом. Эти множества определяются при помощи функций $g_c(k)$ и $g_s(k)$, принимающих значения в характеристических точках $k = l + 1/2$, $l \in \mathbb{Z}_+$,

$$g_c(k) = k, \quad g_s(k+1) = \sqrt{(k+1)^2 - \frac{1}{4}}$$

и удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$g_c(k) < g_s(k+1) < g_c(k+1) < g_s(k+2). \quad (29)$$

Введем интервалы $\Delta(k)$:

$$\begin{aligned} \Delta(0) &= (0; 1/2), \\ \Delta(k) &= (g_c(k), g_c(k+1)] = (k, k+1], \\ (0, \infty) &= \Delta(0) \cup \left\{ g_c\left(\pm\frac{1}{2}\right) \right\} \cup \left(\bigcup_k \Delta(k) \right). \end{aligned}$$

Как следует из (29), каждый интервал $\Delta(k)$ представим в виде $\Delta(k) = \cup_{i=1,2,3} \Delta_i(k)$, где

$$\Delta_1(k) = (g_c(k), g_s(k+1)],$$

$$\begin{aligned} \Delta_2(k) &= (g_s(k+1), g_c(k+1)), \\ \Delta_3(k) &= \{g_c(k+1)\}. \end{aligned}$$

В соответствии с этим разложением, определим три множества $G_i = \bigcup_k \Delta_i(k)$, $i = 1, 2, 3$, изменения параметров связи g , таких что любому значению $g > g_c(\pm 1/2) = 1/2$ можно сопоставить пару двух целых чисел, k и $i = 1, 2, 3$: $g \implies (k, i)$, такую что $g \in G_i$. Тогда, как следует из результатов разд. 5.1, 5.2, получим следующую классификацию:

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{1E}(\rho), & |j| \geq k+1, \end{cases} & g \in \Delta_1(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{2,\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & g \in \Delta_2(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4,\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{3,\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & g \in \Delta_3(k), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{2,\nu,E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & g \in \Delta(0), \\ U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{3,\nu,E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & g = g_c(\pm 1/2). \end{aligned} \tag{30}$$

Теперь мы можем описать спектральную проблему для всех с.с. дираковских гамильтонианов для всех значений g . Отметим, что из неравенства $g > g_s(\pm 1/2) = 0$ и (9) следует важный факт: полный с.с. дираковский гамильтониан \hat{H}_s не определен однозначно для каждого заряда $Z = (e\gamma)/\alpha_F$.

Рассмотрим собственные векторы $\Psi_{sj}(\mathbf{r})$ для с.с. дираковского гамильтониана \hat{H}_s , которые удовлетворяют следующей системе уравнений (см. разд. 3):

$$\hat{H}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = E \Psi_{sj}(\mathbf{r}), \quad \hat{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = j \Psi_{sj}(\mathbf{r}),$$

и имеют вид $\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj} U_E(\rho)$, см. (6).

Для любых констант связи g энергетический спектр любого с.с. дираковского гамильтониана \hat{H}_s состоит из непрерывного спектра, занимающего ось $(-\infty, \infty)$. Все дублеты $U_E(\rho)$ зависят от параметров расширения, от квантовых чисел j , параметра s и константы связи g согласно (30). Отметим, что параметры расширения зависят как от квантовых чисел j , так и от параметра s .

7. ЛОКАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Локальная плотность состояний на единицу поверхности в графене определяется выражением

$$\begin{aligned} N(\rho; E) &= \sum_{E'} |\Psi(\rho; E')|^2 \delta(E - E') = \\ &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j(\rho; E), \\ n_j(\rho; E) &= |\Psi_{sj}(\rho; E)|^2, \end{aligned} \tag{31}$$

см. [8]. Величина $N(\rho; E)dE$ имеет смысл вероятности нахождения квазичастицы на элементарной поверхности графена в данной точке (ϕ, ρ) в диапазоне энергий от E до $E + dE$. Отметим, что существует другое определение локальной плотности состояний в графене, основанное на вычислении мнимой части функции Грина [18]. Подставляя (5) в (31), получим

$$n_j(\rho; E) = \frac{1}{2\pi r} |U_E(\rho)|^2,$$

где дублеты $U_E(\rho)$ для различных значений заряда g и углового момента j определяются выражением

(30). Из равенства $\check{h}(Z, j, s) = \check{h}(Z, -j, -s)$ следует $n_j(\rho; E)|_{s=+1} = n_{-j}(\rho; E)|_{s=-1}$. Отсюда очевидно, что сумма $n_j(\rho; E) + n_{-j}(\rho; E)$ не зависит от выбора параметра $s = \pm 1$. Таким образом, имеет место сохранение симметрии между выбором двух подрешеток в графене в поведении локальной плотности состояний (31).

Рассмотрим сначала случай малых значений параметра связи $g \in \Delta(0)$. В этом случае локальная плотность состояний определяется только некритической и субкритической областями изменения заряда:

$$N(\rho; E) = N_0(\rho, \nu_1; E) = \sum_{|j|>1/2} n_j^1(\rho; E) + n_{j=-1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E), \quad (32)$$

где парциальная локальная плотность состояний $n_j^1(\rho; E)$ отвечает некритической области,

$$n_j^1(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{1E}(\rho)|^2 = |F_1(\rho; E)|^2 \sigma_1'(E) = \frac{(2\rho|E|)^{2\gamma} |\Phi_\gamma(\rho)|^2 e^{\pi g \delta}}{\rho \Gamma^2(1+2\gamma) |\Gamma(ig-\gamma)|^2 [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]}, \quad (33)$$

$$\Phi_\gamma(\rho) = \Phi(\gamma - ig, 1 + 2\gamma, -2iE\rho),$$

а $n_j^{2,\nu_1}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{2,\nu_1}(Z, j, s)$ субкритической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_1 ,

$$n_j^{2,\nu_1}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{2\nu_1,E}(\rho)|^2 \frac{1}{2\pi^2\rho} \frac{\varrho_\gamma(\rho) \cos^2 \nu_1 + \varrho_{-\gamma}(\rho) \sin^2 \nu_1 + \text{Re}(\varrho(\rho)) \sin(2\nu_1)/g}{\varrho_\gamma(\infty) \cos^2 \nu_1 + \varrho_{-\gamma}(\infty) \sin^2 \nu_1 + \text{Re}(\varrho(\infty)) \sin(2\nu_1)/g},$$

$$\varrho_\gamma(\rho) = \frac{|\Phi_\gamma(\rho)|^2}{j+s\gamma} \rho^{2\gamma}, \quad \varrho(\rho) = \frac{g-i\gamma}{j} \Phi_\gamma(\rho) \Phi_{-\gamma}^*(\rho), \quad (34)$$

$$\varrho_\gamma(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_\gamma(\rho) = \frac{\Gamma^2(1+2\gamma) e^{-\delta\pi g} |2E|^{-2\gamma}}{(j+s\gamma)\Gamma(1-ig+\gamma)\Gamma(1+ig+\gamma)},$$

$$\varrho(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho(\rho) = \frac{2\gamma \text{sh}(\pi[g-i\gamma])}{j \sin(2\pi\gamma)} e^{-\delta\pi(g+i\gamma)}.$$

В пределе $g \rightarrow 0$ величина $n_j^1(\rho; E)$ выражается через функции Бесселя:

$$\lim_{g \rightarrow 0} n_j^1(\rho; E) = [J_{|j|-1/2}(E\rho) + J_{|j|+1/2}(E\rho)] \frac{|E|}{4\pi},$$

а суммирование по j , без учета вклада $n_j^{2,\nu_1}(\rho; E)$ от субкритической области, приводит к выражению для свободной плотности состояний квазичастиц в графене:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \sum_{j=-\infty}^{\infty} n_j^1(\rho; E) = \frac{|E|}{2\pi}. \quad (35)$$

На рис. 1 показаны зависимости плотности состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1$, $g = 0.3$. Для малых энергий, $E \rightarrow 0$, имеем

$$n_j^1(\rho; E) \sim \frac{(2\rho|E|)^{2\gamma} e^{\pi g \delta}}{\rho} \Gamma^{-2}(1+2\gamma) |\Gamma(ig-\gamma)|^{-2} = [\text{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)]^{-1}.$$

Заметим, что если параметр с.с. расширения ν_1 равен нулю, то вклад от субкритической области совпадает с вкладом от некритической области,

$$n_j^{2,\nu_1}(\rho; E) \Big|_{\nu_1=0} = n_j^1(\rho; E)$$

и плотность состояний определяется только некритической областью,

$$N_0(\rho, 0; E) = \sum_j n_j^1(\rho; E).$$

Если параметр ν_1 не равен нулю, то даже для малых зарядов примеси вклад слагаемых

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) = n_{j=-1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{2,\nu_1}(\rho; E)$$

в локальную плотность состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ приводит к появлению локальных максимумов (см. рис. 1, 2). На рис. 2 изображены зависимости величины $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ от энергии для различных значений параметра ν_1 для $\rho = 1$, $g = 0.3$. Мы видим, что функция $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ имеет выраженный локальный максимум при различных значениях параметра ν_1 , отличных от нуля.

В окрестности точки $E = 0$ величина имеет асимптотику $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$,

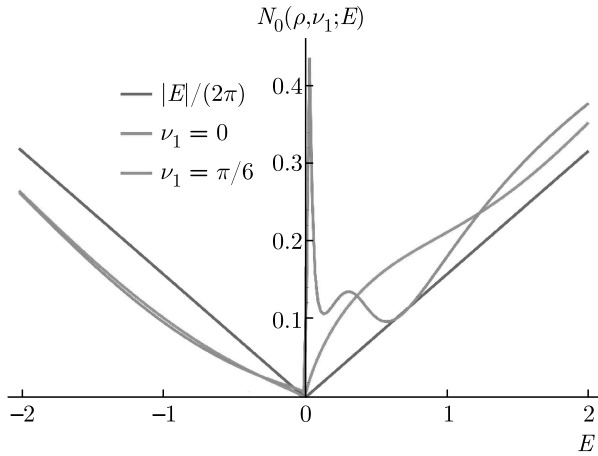


Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_0(\rho, \nu_1; E)$ для $\rho = 1, g = 0.3$ и $\nu_1 = 0, \pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

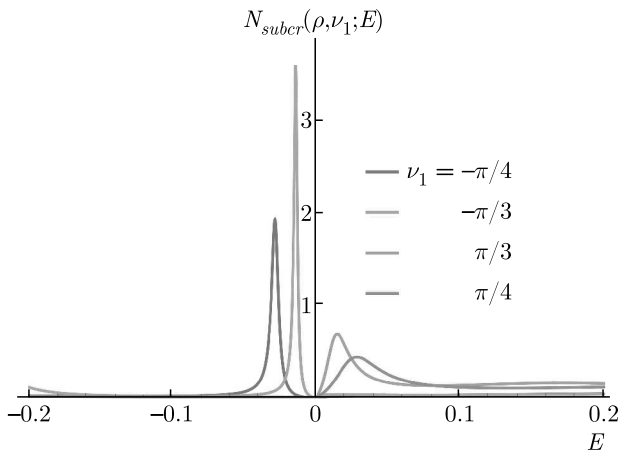


Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости вклада $N_{subcr}(\rho, \nu_1; E)$ от энергии E для $\rho = 1, g = 0.3$ и различных значений параметра с. с. расширения ν_1

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) \sim \frac{1}{C(g)\rho} \times \left[4 \operatorname{tg} \nu + 2\rho^{2\gamma} + \frac{(1-2g^2) \operatorname{tg}^2 \nu}{g^2} \rho^{-2\gamma} \right] |2E|^{2\gamma} e^{\delta\pi g} + O(|2E|^{2\gamma+1}), \quad \gamma = \sqrt{1/4 - g^2} < 1/2,$$

$$C(g) = [\operatorname{ch}(2\pi g) - \cos(2\pi\gamma)] \Gamma(1 + 2\gamma)^2 [\Gamma(ig - \gamma)]^2.$$

Отсюда следует, что даже при $g \rightarrow 0$ и $E \rightarrow 0$ при $\nu_1 \neq 0$ вклад субкритической области отличается от выражения (35) для локальной плотности состояний свободной частицы наличием расходимости по g :

$$N_{subcr}(\rho, \nu_1, E) \sim \frac{|E|}{2\pi} \left[1 + \frac{2 \operatorname{tg} \nu}{\rho} + \frac{1}{2} \left(\frac{\operatorname{tg} \nu}{g\rho} \right)^2 \right],$$

$$E \rightarrow 0, \quad g \rightarrow 0.$$

Тем не менее для любых значений параметра ν_1 величина $N_{subcr}(\rho, \nu_1, E)$ при $E \rightarrow 0$ с точностью до множителя ведет себя как $|E|^{2\gamma}$, что согласуется с результатом работы [8]. Используя представление (14), выражение для $n_j^1(\rho; E)$ можно представить через кулоновские функции (что также согласуется с результатами работы [8]):

$$n_j^1(\rho; E) = \frac{1}{2\pi^2 \rho} \frac{j^2}{\gamma^2} \left(\mathcal{F}_{\gamma-1}^2 + \mathcal{F}_\gamma^2 + \frac{2\tilde{g}}{|j|} \mathcal{F}_{\gamma-1} \mathcal{F}_\gamma \right), \quad \mathcal{F}_\alpha = \mathcal{F}_\alpha(-\tilde{g}; |E|\rho).$$

Для параметров связи $g = g_c(\pm 1/2)$ имеем вклад в локальную плотность состояний от критической области:

$$N(\rho; E) = N_1(\rho, \nu_2; E) = \sum_{|j| > 1/2} n_j^1(\rho; E) + n_{j=-1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E), \quad (36)$$

где $n_j^{3, \nu_2}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{3, \nu_2}(Z, j, s)$ в критической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_2 ,

$$n_j^{3, \nu_2}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{3, \nu_2, E}(\rho)|^2 = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\varrho_1^{(0)}(\rho) \sin^2 \nu_2 + \varrho_2^{(0)}(\rho) \cos^2 \nu_2 + \operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\rho) \sin(2\nu_2)}{\varrho_1^{(0)}(\infty) \sin^2 \nu_2 + \varrho_2^{(0)}(\infty) \cos^2 \nu_2 + \operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\infty) \sin(2\nu_2)},$$

$$\varrho_1^{(0)}(\rho) = |F_1^{(0)}(\rho)|^2, \quad \varrho_1^{(0)}(\infty) = -[g_c(j) \operatorname{Im} f(W)]^{-1},$$

$$\varrho_2^{(0)}(\rho) = |F_2^{(0)}(\rho)|^2, \quad \varrho_2^{(0)}(\infty) = -g_c^{-1}(j) \frac{|f(W)|^2}{\operatorname{Im} f(W)},$$

$$\varrho_3^{(0)}(\rho) = F_1^{(0)}(\rho) F_2^{(0)*}(\rho),$$

$$\operatorname{Re} \varrho_3^{(0)}(\infty) = g_c^{-1}(j) \frac{\operatorname{Re} f(W)}{\operatorname{Im} f(W)}.$$

Вклад критической области при $E \rightarrow 0$ расходится как квадрат логарифма:

$$n_{j=-1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{j=1/2}^{3, \nu_2}(\rho; E) \sim \frac{2 + (\ln \rho + \operatorname{tg} \nu)^2}{\pi^2 \rho} |\operatorname{Im} f(W)| \ln^{-2}(2|E|).$$

На рис. 3 показаны зависимости плотности состояний $N_1(\rho, \nu_2; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1, g = 0.5$.

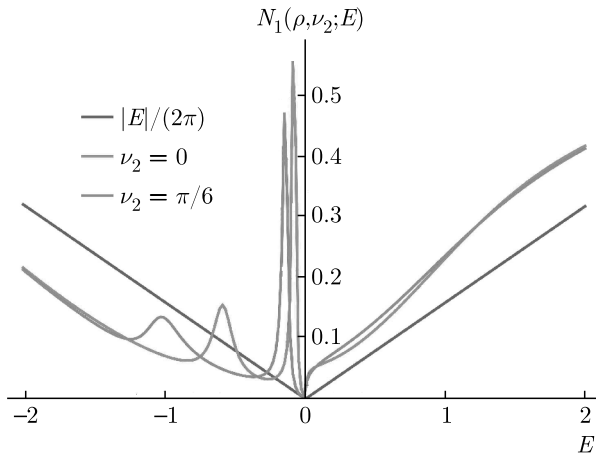


Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_1(\rho, \nu_2; E)$ для $\rho = 1, g = 0.5$ и $\nu_2 = 0, \pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

Для полупелых значений параметра $g \in \Delta_3(k), g = g_c(k), k = 3/2, 5/2, \dots$, вклад в локальную плотность состояний дает субкритическая и сверхкритическая области, в связи с чем эта плотность параметризуется двумя параметрами с.с. расширения ν_2 и ν_3 :

$$N(\rho; E) = N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E) = \sum_{|j| > k+1}^{\infty} n_j^1(\rho, \nu_2, \nu_3; E) + n_{-(k+1)}^{3, \nu_2}(\rho; E) + n_{k+1}^{3, \nu_2}(\rho; E) + \sum_{|j| \leq k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E), \quad (37)$$

где $n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$ соответствует парциальному гамильтониану $\hat{h}_{4, \nu_3}(Z, j, s)$ в сверхкритической области, который параметризуется параметром с.с. расширения ν_3 ,

$$n_j^{4, \nu_3}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi\rho} |U_{4, \nu_3, E}(\rho)|^2 \sigma'_{4, \nu_3}(E) = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\varrho_1(\rho) - \text{Re}\{\varrho_2(\rho) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)])\}}{\varrho_1(\infty) - \text{Re}\{\varrho_2(\infty) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)])\}}. \quad (38)$$

Здесь

$$\varrho_1(\rho) = \frac{g}{2j} \left[\left(1 - \frac{\sigma}{g}\right) |\Phi_{-i\sigma}(\rho)|^2 + \left(1 + \frac{\sigma}{g}\right) |\Phi_{i\sigma}(\rho)|^2 \right],$$

$$\varrho_2(\rho) = \frac{j - i\sigma}{g} \Phi_{i\sigma}(\rho) \Phi_{-i\sigma}^*(\rho)$$

и

$$\varrho_1(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_1(\rho) = -\frac{\delta\sigma}{j} \frac{e^{-\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g - \delta\sigma]) + e^{\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g + \delta\sigma])}{e^{-\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g - \delta\sigma]) - e^{\pi\sigma} \text{sh}(\pi[g + \delta\sigma])},$$

$$\varrho_2(\infty) = \lim_{\rho \rightarrow \infty} \varrho_2(\rho) = \frac{j - i\sigma}{g} \frac{\Gamma^2(1 + 2i\sigma) e^{-\delta\pi g}}{\Gamma(1 - i(g - \sigma)) \Gamma(1 + i(g + \sigma))}.$$

В терминах кулоновских волновых функций имеем

$$n_j^{4, \nu_3}(\rho; E) = \frac{1}{2\pi^2\rho} \times \frac{\tilde{\varrho}_1(\rho) - s \text{sgn}(jE) \text{Re}\{\tilde{\varrho}_2(\rho) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)])\}}{\tilde{\varrho}_1(\infty) - s \text{sgn}(jE) \text{Re}\{\tilde{\varrho}_2(\infty) \exp(2i[\nu_3 + \sigma \ln(\rho)])\}},$$

$$\tilde{\varrho}_1(\rho) = |\mathcal{F}_{i\sigma}|^2 + |\mathcal{F}_{i\sigma-1}|^2 + \frac{2|j|}{\tilde{g}} \text{Re}[\mathcal{F}_{i\sigma-1}^* \mathcal{F}_{i\sigma}],$$

$$\tilde{\varrho}_2(\rho) = \left(2\mathcal{F}_{i\sigma-1} \mathcal{F}_{i\sigma} + \frac{|j|}{\tilde{g}} [\mathcal{F}_{i\sigma}^2 + \mathcal{F}_{i\sigma-1}^2] \right) \times \frac{sj - i\sigma}{g} \frac{\Gamma(2i\sigma)}{\Gamma(-2i\sigma)} \exp[-2i\sigma \ln(2\rho|E|)],$$

$$\mathcal{F}_{i\sigma} = \left(\frac{\tilde{g} + \sigma}{\tilde{g} - \sigma} \right)^{1/4} \mathcal{F}_{i\sigma}(-\tilde{g}; |E|\rho),$$

$$\mathcal{F}_{i\sigma-1} = \left(\frac{\tilde{g} - \sigma}{\tilde{g} + \sigma} \right)^{1/4} \mathcal{F}_{i\sigma-1}(-\tilde{g}; |E|\rho).$$

Из (38) следует, что изменение параметра с.с. расширения приводит к сдвигу фазы $\delta_j(\rho)$. На рис. 4 показаны зависимости плотности состояний $N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 1, g = 3.5$.

Пусть существует полупелое число $k > 1/2$, такое что $g \in \Delta_1(k) = (g_c(k), g_s(k + 1)]$. Тогда в локальную плотность состояний вносит вклад только сверхкритическая область:

$$N(\rho; E) = N_3(\rho, \nu_3; E) = \sum_{|j| \geq k+1} n_j^1(\rho; E) + \sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E). \quad (39)$$

На рис. 5 показаны зависимости плотности состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3, g = 3.7$.

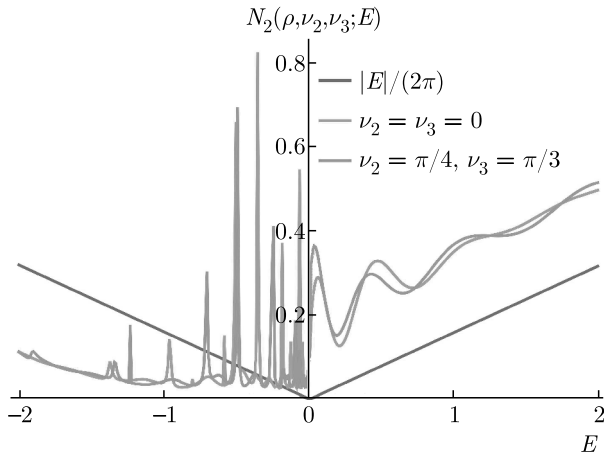


Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_2(\rho, \nu_2, \nu_3; E)$ для $\rho = 1, g = 3.5$ для $\nu_2 = \nu_3 = 0$ и $\nu_2 = \pi/6, \nu_3 = \pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

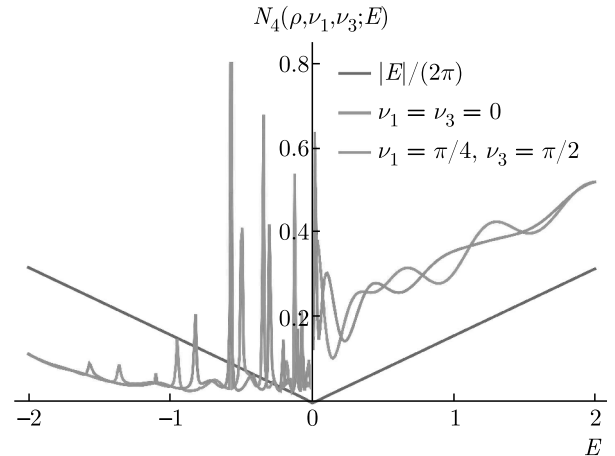


Рис. 6. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ для $\rho = 3, g = 3.48$ для случаев $\nu_1 = \nu_3 = 0$ и $\nu_1 = \pi/4, \nu_3 = \pi/2$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

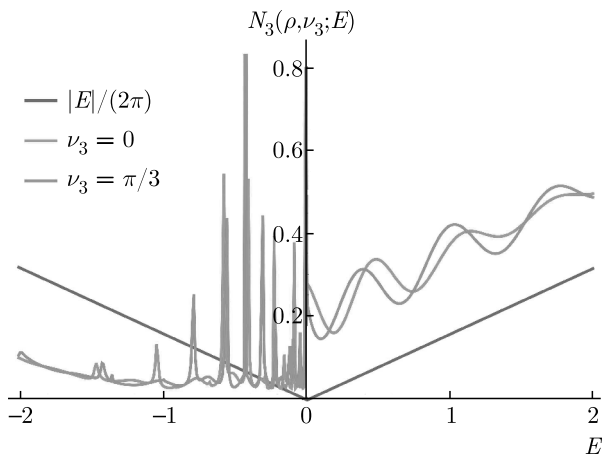


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ для $\rho = 3, g = 3.7$ и $\nu_3 = 0, \pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

Если же существует полуцелое число $k > 1/2$, такое что $g \in \Delta_2(k) = (g_s(k+1), g_c(k+1))$, то локальная плотность состояний параметризуется двумя параметрами с.с. расширения ν_1 и ν_3 :

$$\begin{aligned}
 N(\rho; E) &= N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E) = \\
 &= \sum_{|j| > k+1} n_j^1(\rho; E) + n_{-(k+1)}^{2, \nu_1}(\rho; E) + \\
 &\quad + n_{k+1}^{2, \nu_1}(\rho; E) + \sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E). \quad (40)
 \end{aligned}$$

На рис. 6 показаны зависимости плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3$ и $g = 3.48$.

Отметим, что для всех значений заряда примеси Z имеется нарушение электронно-дырочной симметрии: для положительных и отрицательных значений энергии локальная плотность состояний ведет себя различным образом. Притягивающий кулоновский потенциал примеси приводит к уменьшению локальной плотности состояний для отрицательных значений энергии (дырочной) $E < 0$ относительно состояний с положительной энергией $E > 0$. Данный эффект наиболее сильно проявляется вблизи примеси.

Отметим, что, ввиду экспоненциального множителя $\exp(\delta\pi g)$ в выражении (33), вклад несингулярной области экспоненциально подавлен при отрицательных значениях энергии и основной вклад в локальную плотность состояний $N_3(\rho, \nu_3; E)$ и $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ вносит конечное число слагаемых $\sum_{|j| < k} n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$, отвечающих сверхкритической области. На рис. 7 представлены зависимости вкладов каждой области отдельно для плотности состояний $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$ от энергии квазичастицы для $\rho = 3$ и $g = 3.48$. Из рис. 7 видно, что вклад несингулярной и субкритической областей сильно подавлен в отрицательной области энергий.

Вклад сверхкритической области в (37), (39) и (40) приводит к перестройке плотности состояний вблизи примеси гораздо сильнее, чем вклад субкритической области (34) для малых зарядов $g \in \Delta(0)$. На рис. 3–5 вклад сверхкритической области приводит к наличию резонансов в области отрицательных энергий, которые затухают при удалении от примеси. С увеличением заряда примеси Z количество

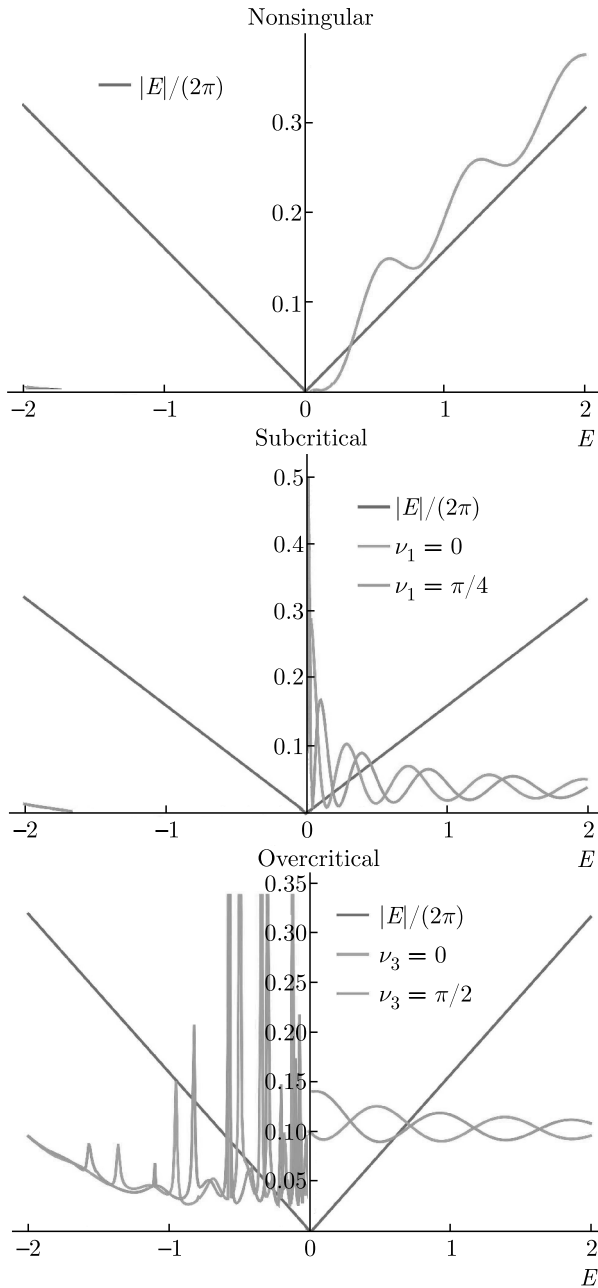


Рис. 7. (В цвете онлайн) Вклады несингулярной (Nonsingular), субкритической (Subcritical) и сверхкритических (Overcritical) областей в $N_4(\rho, \nu_1, \nu_3; E)$

резонансов растет и они сдвигаются вниз по энергии. Точку Дирака можно рассматривать как точку накопления бесконечного множества резонансов [8, 19]. Это объясняется тем, что функции $n_j^{4, \nu_3}(\rho; E)$ в сверхкритической области осциллируют с логарифмически расходящейся частотой $2[\sigma \ln |2E| - \nu_3]$ при $E \rightarrow 0$ для всех значений параметра с.с. расширения ν_3 .

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Отметим, что предыдущая работа с участием авторов [10] была посвящена исследованию спектров массивных квазичастиц в графене в окрестности кулоновской примеси. Настоящая работа является ее естественным продолжением. Здесь исследован случай, когда эффективная масса квазичастиц в графене равна нулю, и показано, что в этом случае структура спектров электронных возбуждений качественно другая. В частности, построено семейство всех возможных с.с. гамильтонианов, отвечающих безмассовым носителям заряда в графене с кулоновскими примесями, которые параметризуются параметрами расширения, и проведен их спектральный анализ. Показано, что спектр с.с. парциальных гамильтонианов является непрерывным, $\text{sp} \hat{h}(Z, j, s) = (-\infty, \infty)$, в отличие от массивного случая, где имеются дискретный и непрерывный спектры.

Вычислены обобщенные собственные функции, отвечающие с.с. парциальным гамильтонианам для любого заряда примеси (см. (30)). А именно, для несингулярной области ($g \leq g_s(j)$) нормированные (обобщенные) собственные функции даются формулой (21), для субкритической области ($g_s(j) < g < g_c(j)$) — формулой (24), для критической области ($g = g_c(j)$) — формулой (26), а для сверхкритической области ($g > g_c(j)$) — формулой (28). Полученные собственные функции оказались существенными для анализа локальной плотности состояний (см. (32), (36), (37) и (40)), которая зависит от параметров с.с. расширения.

Следует отметить, что в работе [20] также рассматривались с.с. дираковские гамильтонианы, отвечающие безмассовым носителям заряда в графене с кулоновскими центрами в сочетании с полем Ааронова–Бома (в $2 + 1$ измерении) за исключением критической области, когда $Z = Z_c(j)$. Однако не были приняты во внимание существенные особенности данной задачи в недопированном графене. Из-за этого радиальные гамильтонианы, которые рассматривались в [20], параметризованы особым образом, что не позволяет отождествить их с соответствующими гамильтонианами реальной задачи в графене.

Финансирование. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 19-12-00042).

ЛИТЕРАТУРА

1. K. Nomura and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 076602 (2007).
2. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira et al., *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1067 (2012).
3. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. C. Neto, *Phys. Rev. B* **78**, 085101 (2008).
4. E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, and O. O. Sobol, *Low Temp. Phys.* **44**, 371 (2018).
5. O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, and V. P. Gusynin, *Phys. Rev. B* **80**, 165429 (2009).
6. A. H. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
7. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, New York (2012).
8. V. M. Pereira, V. M. Nilsson, and A. C. Neto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 166802 (2007).
9. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli et al., *Nano Lett.* **10**, 3360 (2010).
10. А. И. Бреев, Р. Феррейра, Д. М. Гитман, Б. Л. Воронов, *ЖЭТФ* **157**, 847 (2020).
11. Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, *ТМФ* **150**, 41 (2007).
12. D. M. Gitman, I. V. Tyutin, and B. L. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Birkhäuser, New York (2012).
13. D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin et al., *Phys. Scripta* **87**, 038104 (2013).
14. *Graphene Nanoelectronics. Metrology, Synthesis Properties, and Applications*, ed. by H. Raza, Springer, New York (2012).
15. N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Pitman, Boston (1981).
16. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Elements of Quantum Electrodynamics*, Israel Program for Sci. Tr., London (1962).
17. M. Abramovitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Nat. Bureau Stand. (1972).
18. A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, *Europhys. Lett.* **77**, 47002 (2007).
19. A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, and L. S. Levitov, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 246802 (2007).
20. V. R. Khalilov and K. E. Lee, *Int. J. Mod. Phys. A* **27**, 1250169 (2012).