

# КВАНТОВАЯ МЕХАНИКА ГРАФЕНА С ОДНОМЕРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Д. С. Мисерев<sup>a,b</sup>, М. В. Энтин<sup>b\*</sup>

<sup>a</sup> Новосибирский государственный университет  
630090, Новосибирск, Россия

<sup>b</sup> Институт физики полупроводников им. А. В. Ржанова Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 29 марта 2012 г.

Изучены электронные состояния в графене с одномерным потенциалом. Получено приближенное решение при малом угле между импульсом падающего электрона и вектором градиента потенциала. Рассмотрены точно решаемые задачи о потенциале типа сглаженной ступеньки  $U(x) = U \operatorname{th}(x/a)$  и потенциале с особенностью  $U(x) = -U/(|x| + d)$ . Определены коэффициенты и фазы прохождения/отражения для разных потенциальных барьеров. Найдено квазиклассическое решение.

## 1. ВВЕДЕНИЕ

После открытия графена [1, 2] его изучение стало одной из наиболее популярных областей физики твердого тела. Высокая подвижность носителей делает графен перспективным материалом для электроники. Это привело к интенсивным попыткам создать электронные приборы на его основе [3], в частности, баллистические транзисторы с высокой подвижностью носителей в базе. Простейший баллистический транзистор можно представить как участок двумерной плоскости с контактами, в котором с помощью легирования или полевого электрода создан потенциал, зависящий от одной координаты. Частным случаем такой системы является  $p$ - $n$ -переход. Простейшие задачи о прозрачности  $p$ - $n$ -перехода рассматривались в работах [4–7]. В отличие от обычных полупроводников, в графене нулевая щель приводит к слабой изоляции  $p$ - и  $n$ -областей, что затрудняет создание ключа на основе графена.

В ряде работ последнего времени изучались состояния электронов во внешних полях: в одномерной прямоугольной яме [8], в стационарном однородном электрическом поле [9] (включая квазиклассическую оценку вероятности прохождения через этот переход [7, 9]), в системе с треугольным барье-

ром [10]. В работе [11] аналитически рассмотрены задачи об электронных состояниях в магнитном поле с сингулярным векторным потенциалом. Электронный транспорт в экспоненциально убывающем поле изучен в работе [12]. Известны решения для графена в магнитном поле с вектор-потенциалом  $A(x) = (0, \operatorname{th} x, 0)$  [13]. Вольт-амперная характеристика  $p$ - $n$ -перехода изучена в работе [14]. В обзоре [15] рассмотрены некоторые потенциальные задачи в графене.

В настоящей работе рассматривается поведение электронов в потенциальном поле, зависящем только от одной координаты  $x$ :  $U = U(x)$ . В работе построены теория возмущений по малости поперечного импульса и квазиклассическое приближение. Аналитически рассмотрены задачи о состояниях электрона в следующих потенциалах:

$$U(x) = U \operatorname{th} \frac{x}{a}, \quad U(x) = -\frac{U}{|x| + d}.$$

Первый из этих потенциалов возникает в задаче о плавном  $p$ - $n$ -переходе в графене. Второй вид потенциала применим к задаче о состояниях на кулоновской примеси в нанотрубке. Для этих потенциалов точно рассчитаны коэффициенты прохождения, фазы прохождения и отражения, рассмотрены критические случаи, проведено сравнение с квазиклассическим приближением и теорией возмущений. Для потенциала  $U(x) = -U/(|x| + d)$  найдены энергии связанных и квазистационарных состояний.

\*E-mail: entin@isp.nsc.ru; erazorheader@gmail.com

Вблизи конических точек волновые функции  $\Psi$  квазичастиц в графене подчиняются уравнению Шредингера с гамильтонианом

$$\hat{H} = s\sigma\hat{\mathbf{p}} + U(x, y),$$

где  $s$  — скорость Ферми,  $\hat{\mathbf{p}} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y)$  — оператор импульса,  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$  — матрицы Паули. Плотность потока частиц  $\mathbf{j}$  в состоянии  $\Psi$  определяется оператором скорости

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \mathbf{r}] = s\sigma$$

как

$$\mathbf{j} = \Psi^\dagger \hat{\mathbf{v}} \Psi = s\Psi^\dagger \sigma \Psi. \quad (1)$$

В дальнейших вычислениях будем полагать  $\hbar = 1$ ,  $s = 1$ .

Отделяя движение по  $y$ , т.е.  $\Psi(x, y) = \Psi(x) \exp(i\kappa y)$ , и умножая уравнение Шредингера на матрицу  $\sigma_x$ , получим

$$i \frac{d\Psi}{dx} = (U(x) - E) \sigma_x \Psi + i\kappa \sigma_z \Psi.$$

Здесь  $E$  — значение энергии электрона. Легко видеть, что при  $\kappa = 0$  полученное уравнение независимо от вида потенциала  $U(x)$  имеет аналитическое решение, которое представляется в виде бегущих волн со сложной фазой:

$$\Psi(x) = g_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \exp\left(i \int (E - U(x)) dx\right) + g_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \exp\left(-i \int (E - U(x)) dx\right), \quad (2)$$

где  $g_1$  и  $g_2$  — произвольные константы. Видно, что решение (2) невозможно локализовать каким-либо потенциалом  $U(x)$ . Коэффициент прохождения в этом случае равен единице. Отметим, что величина  $E - U(x)$  играет роль импульса частицы и меняет знак при переходе через точки остановки  $x_i$ , где  $U(x_i) = E$ , при этом поток частиц сохраняется всюду, в том числе в этих точках.

Решая задачу с произвольным значением параметра  $\kappa$ , возьмем решение (2) за основу, положив в нем  $g_1$  и  $g_2$  новыми неизвестными функциями координаты  $x$ . После элементарных преобразований волновая функция представляется в виде

$$\Psi(x) = \exp\left(i \int (E - U(x)) dx\right) \times \begin{pmatrix} g(x) + \kappa^{-1} g'(x) \\ g(x) - \kappa^{-1} g'(x) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$g''(x) + 2i(E - U(x))g'(x) - \kappa^2 g(x) = 0. \quad (4)$$

Таким образом, задача сводится к решению дифференциального уравнения (4), которое линейно по потенциалу и не зависит от его производных.

Отметим, что состояния электронов в углеродной нанотрубке могут быть описаны с помощью тех же уравнений, если считать одну из координат, например  $y$ , циклической переменной. Такой подход применим к рассмотрению нанотрубок в приближении огибающих. В такой задаче величина  $\kappa$  оказывается квантованной:  $\kappa = m/d$ ,  $d$  — радиус нанотрубки,  $m$  — целое число.

## 2. ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ

### 2.1. Разложение по малости поперечного импульса

Рассмотрим задачу об отражении от потенциального барьера при  $|E| > \kappa$ . Если импульс  $\kappa \rightarrow 0$ , коэффициент отражения остается малым. В этом пределе можно получить приближенную формулу для коэффициента отражения. При  $\kappa = 0$  из (2) можно выбрать решение с  $g_1 = 1$ ,  $g_2 = 0$ , когда во всем пространстве существует только одна волна  $\exp(i \int (E - U(x)) dx)$ . Если  $\kappa \neq 0$ , то функция  $g(x)$  в (3) зависит от координаты  $x$  и появляется отраженная волна. Решая (4) последовательными приближениями

$$g(x) = 1 + g^{(1)}(x) + \dots,$$

получим:

$$g^{(1)}(x) = \kappa^2 \int_{-\infty}^x \int_{-\infty}^{\eta} \exp\left\{2i \int_{\eta}^{\xi} (E - U(\zeta)) d\zeta\right\} d\xi d\eta,$$

$$\kappa^{-1} g'(x) = \kappa \exp\left\{-2i \int (E - U(x)) dx\right\} \times \int_{-\infty}^x \exp\left\{2i \int_{-\infty}^{\xi} (E - U(\zeta)) d\zeta\right\} d\xi.$$

Коэффициент отражения определяется квадратом модуля коэффициента  $\kappa^{-1} g'(x)$ :

$$R = |\kappa^{-1} g'(-\infty)|^2 = \kappa^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left\{2i \int_{-\infty}^{\xi} (E - U(\zeta)) d\zeta\right\} d\xi \right|^2. \quad (5)$$

Если потенциал мал, а именно,

$$\left| \int_{-\infty}^{\xi} U(\zeta) d\zeta \right| \ll 1,$$

то из (5) следует, что

$$R = \frac{\kappa^2}{E^2} \left| \int_{-\infty}^{\infty} U(\zeta) \exp(2iE\zeta) d\zeta \right|^2. \quad (6)$$

Формулу (5) можно использовать для оценки коэффициента отражения при прохождении под произвольным барьером. При наличии точек поворота  $x_i$  можно найти асимптотику интеграла (5) по методу стационарной фазы. В случае одной точки поворота  $x_0$ , лежащей на действительной оси, получаем искомую оценку коэффициента отражения:

$$R \approx \kappa^2 \left| \int_{-\infty}^{\infty} \exp \{ iF(x - x_0)^2 \} dx \right|^2 = \frac{\pi\kappa^2}{|F|}, \quad (7)$$

где

$$F = - \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x_0}.$$

Критерием применимости формул (5) и (7) является малость коэффициента отражения, откуда из (7) следует условие  $\kappa^2 \ll |F| \sim U_0/a$ , где  $U_0$  и  $a$  — характерная амплитуда и пространственный масштаб потенциала.

В случае барьера с симметричными асимптотиками  $U(\pm\infty) \rightarrow 0$  имеются, как минимум, две точки остановки, например,  $x_1$  и  $x_2$ . В этом случае также рассмотрим асимптотическую оценку формулы (5):

$$R \approx \pi\kappa^2 \left( \frac{1}{|F_1|} + \frac{1}{|F_2|} - \frac{2}{|F_1 F_2|} \times \right. \\ \left. \times \sin \left( 2 \int_{x_1}^{x_2} |E - U(x)| dx \right) \right). \quad (8)$$

Таким образом, формула (8) учитывает интерференцию между волнами, отраженными от различных точек поворота. Действительно, прошедшая и отраженная волны между точками поворота набирают фазу

$$\Phi_0 = \int_{x_1}^{x_2} (E - U(x)) dx,$$

что обеспечивает разность фаз  $\delta\Phi = 2\Phi_0$ . Кроме того, в точках остановки набирается квазиклассическая фаза  $\pm\pi/4$ . Отметим, что в указанном приближении при

$$|F_1| = |F_2|, \quad \int_{x_1}^{x_2} |E - U(x)| dx = \frac{\pi}{4} + \pi n$$

коэффициент отражения обращается в нуль согласно (8), т. е. прохождение носит резонансный характер.

## 2.2. Квазиклассическое приближение

Восстановим размерность в уравнении Шредингера:

$$i\hbar \frac{d\Psi}{dx} = \frac{U(x) - E}{s} \sigma_x \Psi + ip_y \sigma_z \Psi.$$

Постоянную Планка устремим к нулю,  $\hbar \rightarrow 0$ , при таком предельном переходе импульс и его компоненты сохраняют свои значения неизменными. Поэтому введем в этом разделе обозначение для поперечного импульса  $p_y = \hbar\kappa$ .

Представив волновую функцию в виде

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \exp \left( \frac{i}{\hbar} \alpha(x) \right) \\ \exp \left( \frac{i}{\hbar} \beta(x) \right) \end{pmatrix},$$

где

$$\alpha(x) = \alpha_0(x) + \frac{\hbar}{i} \alpha_1(x) + O(\hbar^2),$$

$$\beta(x) = \beta_0(x) + \frac{\hbar}{i} \beta_1(x) + O(\hbar^2),$$

приходим к связанным уравнениям для функций  $\alpha(x)$  и  $\beta(x)$ :

$$\alpha'(x) + ip_y = \frac{E - U(x)}{s} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (\beta(x) - \alpha(x)) \right\}, \quad (9) \\ \beta'(x) - ip_y = \frac{E - U(x)}{s} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} (\beta(x) - \alpha(x)) \right\}.$$

В правой части системы (9) стоят быстро осциллирующие экспоненты. Из разложения функций  $\alpha(x)$ ,  $\beta(x)$  следует, что  $\alpha_0(x) = \beta_0(x)$ . Дальнейшее решение системы (9) последовательными приближения-

ми позволяет установить следующий вид квазиклассической волновой функции:

$$\Psi(x) = \frac{c}{\sqrt{2}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int p_x dx\right) \times \begin{pmatrix} \left(1 - i\frac{p_y}{p_x}\right)^{1/2} \\ \left(1 + i\frac{p_y}{p_x}\right)^{1/2} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$p_x = \pm \sqrt{\left(\frac{E - U(x)}{s}\right)^2 - (p_y)^2}.$$

Квазиклассическое рассмотрение неприменимо в области, где продольный импульс близок к нулю, так как волновая функция имеет особенность  $1/\sqrt{p_x}$ .

Условие применимости квазиклассического приближения получим из требования  $|\alpha'_0(x)| \gg |\hbar\alpha'_1(x)|$ . Введем в рассмотрение величину  $\lambda = \hbar/p_x$ . Тогда условие применимости квазиклассического приближения имеет вид

$$\frac{d\lambda}{dx} \ll \frac{E - U(x)}{sp_y} \quad (11)$$

или после подстановки величин в явном виде —

$$\frac{\hbar p_y U'(x)}{sp_x^3} \ll 1. \quad (12)$$

Квазиклассическая волновая функция в графене имеет те же особенности в точках поворота (точки, где  $p_x = 0$ ), что и квазиклассическая волновая функция частиц с квадратичной дисперсией, поэтому условия шивки и правило квантования Бора-Зоммерфельда будут идентичными [16].

### 3. ТОЧНО РЕШАЕМЫЕ ЗАДАЧИ

#### 3.1. Гладкая ступенька

В графене  $p$ - $n$ -переход может быть модельно описан с помощью потенциала в виде ступеньки  $U(x) = U \text{th}(x/a)$ , см. рис. 1. В пределе малой толщины перехода этот потенциал переходит в ступеньку Клейна, а при  $\lambda_B \ll a$ , где  $\lambda_B \sim 2\pi/(E + U)$  — длина волны де Бройля, задача становится квазиклассической и барьер можно заменить однородным полем  $F = U/a$ . Приближение однородного поля применимо для энергий, удовлетворяющих условиям  $E + U \gg 2\pi/a$  и  $U - \kappa > E > \kappa - U$ .

Проведя в уравнении (4) подстановку

$$g(x) \rightarrow e^{ikx - i(E+U)x} F_1(x)$$

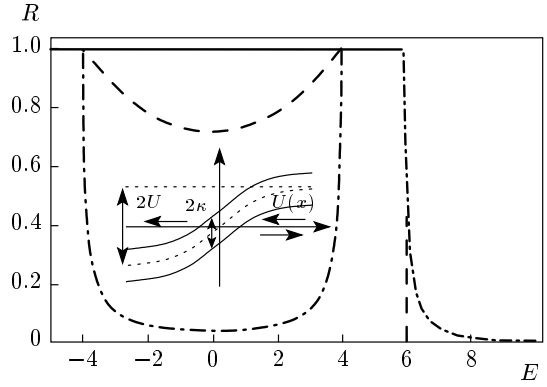


Рис. 1. На вставке: энергетическая диаграмма в задаче о  $p$ - $n$ -переходе, моделируемом гладкой ступенькой  $U(x) = U \text{th}(x/a)$ ; график потенциала изображен пунктирной линией, сплошные линии соответствуют дну зоны проводимости и потолку валентной зоны. На основном рисунке: соответствующие зависимости коэффициента отражения  $R$  от энергии  $E$  при  $\kappa = 1$ ,  $U = 5$ ,  $a = 20$  (сплошная линия), 2 (штриховая), 0.02 (штрихпунктирная)

и сделав замену аргумента  $\zeta = -\exp(2x/a)$ , приходим к уравнению для невырожденной гипергеометрической функции Гаусса  $F(\alpha, \beta; \gamma; \zeta)$ . В качестве  $g(x)$  выберем решение с положительным значением  $k = \sqrt{(E + U)^2 - \kappa^2}$ :

$$F_1(x) = F\left(\frac{ia}{2}(k - q - 2U), \frac{ia}{2}(k + q - 2U); 1 + iak; -e^{2x/a}\right),$$

где

$$q = \sqrt{(E - U)^2 - \kappa^2}.$$

Тогда полная волновая функция имеет следующий вид:

$$\psi = (e^{2x/a} + 1)^{-iUa} e^{ikx} \left( F_1(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{E + U - k}{\kappa} \left( -iF_1(x) + \frac{2aU}{1 + iak} e^{2x/a} F_2(x) \right) \times \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right), \quad (13)$$

где

$$F_2(x) = F\left(\frac{ia}{2}(k - q - 2U) + 1, \frac{ia}{2}(k + q - 2U) + 1; 2 + iak; -e^{2x/a}\right).$$

Выпишем асимптотики волновой функции на бесконечности, выделив падающую  $\psi_f$ , отраженную  $\psi_r$  и прошедшую  $\psi_t$  волны:

$$\psi(x \rightarrow -\infty) = \psi_t = e^{ikx} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i \frac{E+U-k}{\kappa} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right), \quad (14)$$

$$\psi(x \rightarrow +\infty) = \psi_f + \psi_r.$$

Здесь падающая  $\psi_f$  и отраженная  $\psi_r$  плоские волны определяются направлением соответствующих потоков:

$$\begin{aligned} \psi_f &= e^{iqx} \times \\ &\times \frac{\Gamma(1+iak)\Gamma(iaq)}{\Gamma\left(\frac{ia}{2}(k+q-2U)\right)\Gamma\left(1+\frac{ia}{2}(k+q+2U)\right)} \times \\ &\times \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - i \frac{E-q-U}{\kappa} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right), \quad (15) \\ \psi_r &= \psi_f(-q), \end{aligned}$$

где  $\Gamma(x)$  — гамма-функция Эйлера. Такая классификация верна только при условии  $E > U + \kappa$  или  $E < -\kappa - U$ . В случае  $U - \kappa > E > \kappa - U$  в формулах (14) и (15) следует поменять местами индексы «f» и «r».

Найдем потоки в соответствии с определением (1):

$$\begin{aligned} j_f &= \psi_f^\dagger \sigma_x \psi_f = 2 \left( 1 - \left( \frac{E-q-U}{\kappa} \right)^2 \right) \times \\ &\times \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k+q+2U)\right)}{\text{sh}(\pi a k)} \times \\ &\times \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k+q-2U)\right)}{\text{sh}(\pi a q)} \frac{k}{q} \frac{k+q-2U}{k+q+2U}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_r &= \psi_r^\dagger \sigma_x \psi_r = 2 \left( 1 - \left( \frac{E+q-U}{\kappa} \right)^2 \right) \times \\ &\times \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k-q+2U)\right)}{\text{sh}(\pi a k)} \times \\ &\times \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k-q-2U)\right)}{\text{sh}(\pi a q)} \frac{k}{q} \frac{k-q-2U}{k-q+2U}, \end{aligned}$$

$$j_t = \psi_t^\dagger \sigma_x \psi_t = 2 \left( 1 - \left( \frac{E+U-k}{\kappa} \right)^2 \right).$$

В случае  $U - \kappa > E > \kappa - U$  следует поменять местами индексы «r» и «f».

Таким образом, найдена точная формула для коэффициента отражения:

$$\begin{aligned} R &= \left| \frac{j_r}{j_f} \right| = \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k-q-2U)\right)}{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k+q+2U)\right)} \times \\ &\times \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k-q+2U)\right)}{\text{sh}\left(\frac{\pi a}{2}(k+q-2U)\right)} \equiv \\ &\equiv \frac{\text{ch}(\pi a(k-q)) - \text{ch}(2\pi a U)}{\text{ch}(\pi a(k+q)) - \text{ch}(2\pi a U)}. \quad (16) \end{aligned}$$

В интервале энергий  $U - \kappa > E > \kappa - U$  коэффициент отражения определяется выражением, обратным к (16). В интервале энергий  $U + \kappa > E > U - \kappa$  частицы полностью отражаются. Очевидно, что полученное выражение симметрично по  $E$ , что отражает симметрию задачи.

При  $a \rightarrow 0$  формула (16) дает результат для резкой ступеньки:

$$R = \frac{4U^2 - (k-q)^2}{4U^2 - (k+q)^2}. \quad (17)$$

В противоположном случае при  $a \rightarrow \infty$  в области энергий  $U - \kappa > E > \kappa - U$  разложение приводит к квазиклассическому результату:

$$T \approx \exp(-\pi a(2U - k - q)). \quad (18)$$

Условия применимости приближения:  $aU \gg 1$ ,  $aq \gg 1$ ,  $ak \gg 1$ .

Зависимость  $R(E)$  при различных значениях параметра  $a$  приведена на рис. 1.

Асимптотика волновой функции позволяет найти фазы отражения и прохождения. Если асимптотики падающей и отраженной волн записаны в виде

$$\psi_f = \begin{pmatrix} 1 \\ \exp(i\varphi_0) \end{pmatrix} \exp(\pm iqx),$$

$$\psi_r = r \begin{pmatrix} 1 \\ -\exp(-i\varphi_0) \end{pmatrix} \exp(\mp iqx),$$

то фаза отражения определяется как аргумент комплексного числа  $r$ :  $\varphi_r = \text{Arg } r$ . Для определенности в обозначениях интервалов энергии положим  $U > \kappa$ . Фаза отражения равна

$$\varphi_r = \begin{cases} \pm \text{Arg} \left[ \frac{\Gamma(iaq)\Gamma\left(\frac{ia}{2}(k-q-2U)\right)\Gamma\left(1+\frac{ia}{2}(k-q+2U)\right)}{\Gamma(-iaq)\Gamma\left(\frac{ia}{2}(k+q-2U)\right)\Gamma\left(1+\frac{ia}{2}(k+q+2U)\right)} \frac{E-q-U+i\kappa}{E+q-U+i\kappa} \right], \\ \text{Arg} \left[ \frac{\Gamma(iaq)\Gamma\left(\frac{a\gamma}{2}-\frac{ia}{2}(2U+q)\right)\Gamma\left(1+\frac{a\gamma}{2}+\frac{ia}{2}(2U-q)\right)}{\Gamma(-iaq)\Gamma\left(\frac{a\gamma}{2}-\frac{ia}{2}(2U-q)\right)\Gamma\left(1+\frac{a\gamma}{2}+\frac{ia}{2}(2U+q)\right)} \frac{E-q-U+i\kappa}{E+q-U+i\kappa} \right], \quad \kappa-U > E > -\kappa-U, \end{cases} \quad (19)$$

где знак плюс соответствует области  $U - \kappa > E > \kappa - U$ , а минус — областям  $E > U + \kappa$ ,  $E < -U - \kappa$ ,

$$\gamma = \sqrt{\kappa^2 - (E + U)^2}.$$

В предельном случае  $a \rightarrow 0$  выражение (19) переходит в результат для ступеньки Клейна [8]:

$$\varphi_r = \begin{cases} \text{Arg}[-(\kappa - iq)], & E > U + \kappa, \\ \text{Arg}[-\kappa - iq], & U - \kappa > E > \kappa - U, \\ \text{Arg}[-(\kappa + iq)(2U(E + U) + \gamma^2 + iq\gamma)], & \kappa - U > E > -\kappa - U, \\ \text{Arg}[\kappa - iq], & E < -\kappa - U. \end{cases} \quad (20)$$

В противоположном случае гладкого барьера,  $a \rightarrow \infty$ , можно провести асимптотическое разложение формулы (19) в области энергий  $U - \kappa > E > \kappa - U$ :

$$\varphi_r = \text{Arg} \left[ (q - i\kappa) \exp \left\{ ia \left( k \ln \frac{4U\kappa}{4U^2 - (k+q)^2} + U \ln \frac{U - E - q}{U - E + q} + q \ln \frac{q^2}{\kappa U} \right) \right\} \right]. \quad (21)$$

Разложение (21) соответствует квазиклассическому пределу:

$$\varphi_{WKV} = 2 \int_{x_0}^{\infty} (q(x) - q) dx - 2qx_0 + \varphi_0. \quad (22)$$

Здесь

$$q(x) = \sqrt{\left(E - U \operatorname{th} \frac{x}{a}\right)^2 - \kappa^2}$$

— импульс вдоль оси  $x$ ,

$$x_0 = -\frac{a}{2} \ln \left( \frac{2U}{E + U + \kappa} - 1 \right)$$

— точка остановки,

$$\varphi_0 = \text{Arg}[q - i\kappa], \quad q = \sqrt{(E - U)^2 - \kappa^2}.$$

Проинтегрировав (22) по  $q(x)$ , находим

$$\varphi_{WKV} = a \left( k \ln \frac{4U\kappa}{4U^2 - (k+q)^2} + U \ln \frac{U - E - q}{U - E + q} + q \ln \frac{q^2}{\kappa U} \right) + \varphi_0. \quad (23)$$

Таким образом, при большой ширине ступеньки  $a$  фаза отражения (21) полностью совпадает с квазиклассической фазой (23) в области энергий  $U - \kappa > E > \kappa - U$ .

Аналогично определяется фаза прохождения:

$$\varphi_t = \pm \text{Arg} \left[ \frac{\Gamma\left(\frac{ia}{2}(k-q-2U)\right)\Gamma\left(1+\frac{ia}{2}(k-q+2U)\right)}{\Gamma(-iaq)} \times \frac{E - k + U + i\kappa}{E + q - U + i\kappa} \right], \quad (24)$$

где знак плюс соответствует области  $U - \kappa > E > \kappa - U$ , а минус — областям  $E > U + \kappa$ ,  $E < -U - \kappa$ . При малых  $a$  фаза прохождения совпадает с формулой для потенциальной ступеньки:

$$\varphi_t = \pm \text{Arg} \frac{E - k + U + i\kappa}{E + q - U + i\kappa}, \quad (25)$$

где знак плюс соответствует области  $U - \kappa > E > \kappa - U$ , а минус — областям  $E > U + \kappa$ ,  $E < -U - \kappa$ . Разложение формулы (24) при больших значениях параметра  $a$  в области энергий  $\kappa - U < E < U - \kappa$  совпадает с квазиклассической фазой прохождения:

$$\varphi_t = \text{Arg} \frac{E - k + U + i\kappa}{E + q - U + i\kappa} + a \left\{ \frac{k}{2} \ln \left( \frac{a^2}{e^2} \left( U^2 - \left( \frac{k - q}{2} \right)^2 \right) \right) + U \ln \frac{U + \frac{k - q}{2}}{U - \frac{k - q}{2}} + q \ln \frac{q^2}{U^2 - \left( \frac{k - q}{2} \right)^2} \right\} + \frac{\pi}{4}.$$

### 3.2. Одномерный кулоновский потенциал

#### 3.2.1. Волновые функции

Рассмотрим потенциал  $U(x) = -U/(|x| + d)$  (рис. 2). Этот потенциал может моделировать заряженную примесь в нанотрубке, расположенную на оси  $x$ , для которой

$$U(x) = -\frac{U}{\sqrt{x^2 + d^2}}.$$

Если  $\kappa = 0$ , то возникающее состояние является де-локализованным и безотражательным. При  $\kappa \neq 0$  возникает локализация вдоль оси  $x$ , дающая ряд дискретных уровней, сгущающихся к точке  $E = \kappa - 0$ .

Дифференциальное уравнение для функции  $g(x)$  в области  $x > 0$  имеет вид

$$g''(x) + 2i \left( E + \frac{U}{x+d} \right) g'(x) - (E^2 - k^2)g(x) = 0, \quad x > 0. \quad (26)$$

Выберем решение

$$g(x) = \exp(ikx - iEx)G_0(x),$$

где

$$G_0(x) = G \left( \frac{iU(k - E)}{k}; 2iU; -2ik(d + x) \right)$$

— вырожденная гипергеометрическая функция второго рода. Уравнение для  $g(x)$  в левой полуплоскости переходит в уравнение (26) при одновременной смене знака параметров  $d$  и  $U$ . Поэтому для полупространства  $x < 0$  получаем общий вид решения:

$$g(x) = \exp(ikx - iEx) (C_1 G_1(x) + C_2 F_1(x)), \quad (27)$$

где  $C_1$  и  $C_2$  — константы, определяемые из условия сшивки в нуле,

$$G_1(x) = G \left( -\frac{iU(k - E)}{k}; -2iU; 2ik(d - x) \right),$$

$$F_1(x) = F \left( -\frac{iU(k - E)}{k}; -2iU; 2ik(d - x) \right)$$

— вырожденная гипергеометрическая функция первого рода.

Отсюда несложно найти волновую функцию, используя следующие правила дифференцирования вырожденных гипергеометрических функций первого и второго рода:

$$\frac{dG(\alpha; \gamma; \zeta)}{d\zeta} = -\alpha G(\alpha + 1; \gamma + 1; \zeta), \quad (28)$$

$$\frac{dF(\alpha; \gamma; \zeta)}{d\zeta} = \frac{\alpha}{\gamma} F(\alpha + 1; \gamma + 1; \zeta).$$

Волновая функция в правом полупространстве равна

$$\psi_+ = \left( \frac{x}{d} + 1 \right)^{iU} \times e^{ikx} \left[ G_0(x) \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{i(E - k)}{\sqrt{E^2 - k^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right) + 2U \frac{E - k}{\sqrt{E^2 - k^2}} G_2(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right], \quad (29)$$

$$G_2(x) = G \left( 1 + \frac{iU(k - E)}{k}, 1 + 2iU, -2ik(d + x) \right).$$

Волновую функцию в левом полупространстве представим в наиболее общем виде:

$$\psi_- = \left( -\frac{x}{d} + 1 \right)^{-iU} e^{ikx} \left( u_1(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{i(E - k)}{\sqrt{E^2 - k^2}} u_2(x) \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right). \quad (30)$$

Здесь введены обозначения:

$$u_1(x) = C_1 G_1(x) + C_2 F_1(x),$$

$$u_2(x) = C_1 (G_1(x) - 2iUG_3(x)) + C_2 (F_1(x) - F_2(x)),$$

где

$$G_3(x) = G \left( 1 - \frac{iU(k - E)}{k}; 1 - 2iU; 2ik(d - x) \right),$$

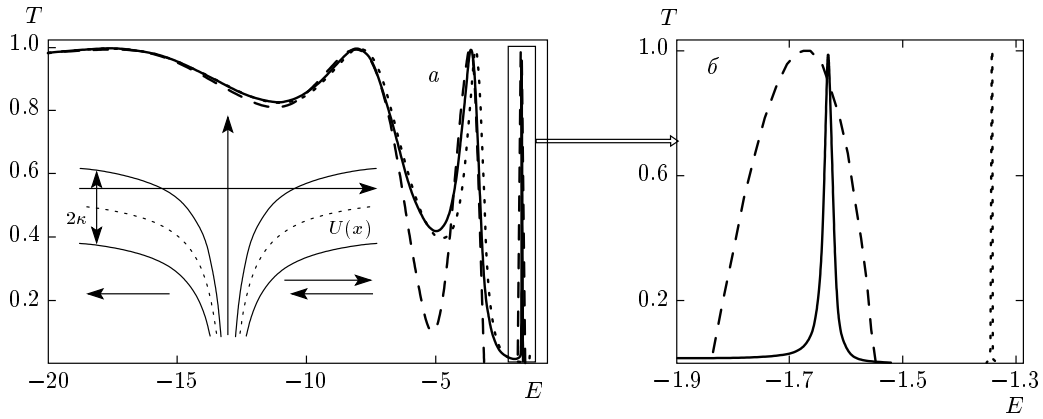
$$F_2(x) = F \left( 1 - \frac{iU(k - E)}{k}; 1 - 2iU; 2ik(d - x) \right).$$

Константы  $C_1$  и  $C_2$  определим из свойства непрерывности волновой функции в нуле  $\psi_-(-0) = \psi_+(+0)$ :

$$C_1 = -\frac{G_0 F_2 + 2iUG_2 F_1}{2iUG_3 F_1 - G_1 F_2}, \quad (31)$$

$$C_2 = \frac{2iU(G_1 G_2 + G_0 G_3)}{2iUG_3 F_1 - G_1 F_2}.$$

Здесь  $G_0, G_1, G_2, G_3, F_1, F_2$  — значения соответствующих функций в точке  $x = 0$ .



**Рис. 2.** а) Вставка: энергетическая диаграмма в задаче о состояниях квазичастицы в одномерном кулоновском потенциале  $U(x) = -U/(|x| + d)$ ; пунктирные линии — график потенциала, сплошные линии — дно зоны проводимости и потолок валентной зоны. Основной график: зависимости коэффициента прохождения  $T$  от  $E$  в области отрицательных энергий при  $\kappa = 1, d = 0.001, U = 2$ ; сплошная линия — точная кривая, штриховая — приближение малых  $\kappa$ , пунктирная — квазиклассическое приближение. б) Развернутая область резонансов

**3.2.2. Асимптотики волновых функций**

Для определения коэффициента прохождения и энергий связанных состояний найдем асимптотики волновых функций при  $x \rightarrow +\infty$  и  $x \rightarrow -\infty$ . Справа в выражениях остаются только члены, отвечающие прошедшей волне. Ее асимптотика записывается как

$$\psi(x \rightarrow \infty) = \psi_t = \left(\frac{x}{d}\right)^{iU} (2kx)^{-iU(1-E/k)} \times \exp\left\{-\frac{\pi}{2}U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \times \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{i(E-k)}{\sqrt{E^2-k^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\right) \exp(ikx). \quad (32)$$

В разложении волновой функции при  $x \rightarrow -\infty$  сразу выделим падающую и отраженную волны. Выражение для падающей волны имеет вид

$$\psi_f = \left(-\frac{x}{d}\right)^{-iU} (-2kx)^{iU(1-E/k)} \times \exp\left\{-\frac{\pi}{2}U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \times \left(C_1 + C_2 \exp\left\{\pi U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1+E/k))}\right) \times \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{i(E-k)}{\sqrt{E^2-k^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\right) \exp(ikx). \quad (33)$$

Отраженная волна не содержит зависимости от коэффициента  $C_1$ :

$$\psi_r = C_2 \left(-\frac{x}{d}\right)^{-iU} (-2kx)^{iU(1+E/k)} \times \exp\left\{-\frac{\pi}{2}U\left(1 + \frac{E}{k}\right)\right\} \times \exp(2ikd) \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1-E/k))} \times \left(\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{i(E+k)}{\sqrt{E^2-k^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}\right) \exp(-ikx). \quad (34)$$

**3.2.3. Коэффициент прохождения**

Потоки находим усреднением оператора скорости по соответствующим состояниям:

$$j_f = \frac{4k}{k+E} \exp\left\{-\pi U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \times \left|C_1 + C_2 \exp\left\{\pi U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1+E/k))}\right|^2, \\ j_r = \frac{4k}{k-E} \exp\left\{-\pi U\left(1 + \frac{E}{k}\right)\right\} \left|\frac{C_2 \Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1-E/k))}\right|^2, \\ j_t = \frac{4k}{k+E} \exp\left\{-\pi U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\}.$$

Точная формула для коэффициента прохождения имеет вид

$$T = \left|C_1 + C_2 \exp\left\{\pi U\left(1 - \frac{E}{k}\right)\right\} \times \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1+E/k))}\right|^{-2}. \quad (35)$$



### 3.2.4. Фазы прохождения и отражения

Асимптотическое разложение волновой функции позволяет найти также фазы прохождения и отражения. Отметим логарифмическую расходимость фазы

$$\delta\varphi = \frac{2UE}{k} \ln(2k|x|),$$

обусловленную асимптотикой потенциала  $U \sim 1/x$ , которая дает бесконечную по величине добавку в формулах для фаз при действительном значении  $k$ :

$$\begin{aligned} \varphi_t = & -2U \ln(2kd) - \\ & - \text{Arg} \left[ C_1 + C_2 \exp \left\{ \pi U \left( 1 - \frac{E}{k} \right) \right\} \times \right. \\ & \left. \times \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1 + E/k))} \right] + \delta\varphi, \quad (36) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi_r = & 2kd + \text{Arg} \left[ \frac{C_2 \Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1 - E/k))} \frac{\kappa - i(E + k)}{\kappa - i(E - k)} \times \right. \\ & \times \left( C_1 + C_2 \exp \left\{ \pi U \left( 1 - \frac{E}{k} \right) \right\} \times \right. \\ & \left. \left. \times \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1 + E/k))} \right)^{-1} \right] + \delta\varphi. \quad (37) \end{aligned}$$

В области энергий  $\kappa > E > -\kappa$  при  $U > 2\kappa d$  и  $\kappa > E > U/d - \kappa$  при  $U < 2\kappa d$ , которая соответствует дискретному спектру, импульс  $k$  становится чисто мнимым:  $k = i\gamma$ , где  $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - E^2}$  — действительная величина в данной области энергий. И выражение для фазы отражения принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \varphi_r = & \text{Arg} \left[ \frac{C_2 \Gamma(-2iU)}{\Gamma \left( -iU \left( 1 + i \frac{E}{\gamma} \right) \right)} \frac{\kappa + \gamma - iE}{\kappa - \gamma - iE} \times \right. \\ & \times \left( C_1 + C_2 \exp \left\{ \pi U \left( 1 + i \frac{E}{\gamma} \right) \right\} \times \right. \\ & \left. \left. \times \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma \left( -iU \left( 1 - i \frac{E}{\gamma} \right) \right)} \right)^{-1} \right] + \frac{\pi UE}{\gamma}. \quad (38) \end{aligned}$$

### 3.2.5. Приближенные формулы для коэффициента прохождения

Рассмотрим случай малых  $\kappa$ . В этом случае точки остановки определяются из условия  $E = U(x_{1,2})$ , т. е.

$$x_1 = -\frac{U}{E} - d, \quad x_2 = -x_1.$$

На рис. 2 сплошной линией показан график зависимости коэффициента прохождения  $T$  от энергии налетающих частиц  $E$  при следующих значениях параметров:  $U = 2, \kappa = 1, d = 0.001$ . Штриховая линия соответствует значениям коэффициента прохождения по приближенной формуле (8). Проведя в (8) элементарное интегрирование, получим разложение коэффициента прохождения по параметру  $\kappa$ :

$$\begin{aligned} T_{appr} = & 1 - \frac{2\pi U \kappa^2}{E^2} \times \\ & \times \left\{ 1 + \sin \left[ 4U \left( \ln \left( -\frac{U}{dE} \right) - \frac{U + dE}{U} \right) \right] \right\}. \quad (39) \end{aligned}$$

Рисунок 2 демонстрирует высокую степень точности приближенной формулы (39) и аналитического выражения (35) в области больших отрицательных энергий  $|E| \gg \kappa U$ .

Приведем также квазиклассическую оценку коэффициента прохождения. Несложно заметить, что при  $U > 2\kappa d$  существует область энергий  $-\kappa d > dE > -U + \kappa d$ , в которой частицы имеют четыре точки остановки:

$$\begin{aligned} x_1 = & \frac{U}{-E + \kappa} - d, \quad x_2 = \frac{U}{-E - \kappa} - d, \\ x_3 = & -x_1, \quad x_4 = -x_2. \end{aligned}$$

Электрону с энергией, лежащей в этом интервале, необходимо преодолеть две пространственно-разделенные запрещенные зоны. Для определения суммарной прошедшей волны воспользуемся многоволновым методом, учитывая добавку к фазе  $-\pi/4$  при каждом отражении. Обозначая как  $t$  и  $r$  соответственно коэффициенты прохождения и отражения по амплитуде волновой функции от одного из барьеров, получаем для прошедшей волны выражение:

$$\begin{aligned} \Psi_{pas} = & \left( t^2 + t^2 r^2 \exp \left\{ i \left( \Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right\} + \right. \\ & \left. + t^2 r^4 \exp \left\{ 2i \left( \Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right\} + \dots \right) \Psi_0 \exp \left\{ i \left( \Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right\} = \\ = & \frac{t^2}{1 - r^2 \exp \left\{ i \left( \Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right\}} \Psi_0 \exp \left\{ i \left( \Phi - \frac{\pi}{2} \right) \right\}. \end{aligned}$$

Здесь

$$\Phi = 2 \int_{-x_1}^{x_1} \sqrt{\left( E + \frac{U}{|x| + d} \right)^2 - \kappa^2} dx$$

— фаза, определяемая разностью хода. Квазиклас-

сический коэффициент прохождения  $T_0 = t^2$  сквозь одну запрещенную зону определяется выражением:

$$T_0 = \exp \left\{ -2 \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{\kappa^2 - \left( E + \frac{U}{|x| + d} \right)^2} dx \right\}.$$

Итак, получаем квазиклассическую оценку для коэффициента прохождения в случае четырех точек остановки на действительной оси:

$$T_{WKV} = \frac{T_0^2}{1 + R_0^2 - 2R_0 \sin \Phi}. \quad (40)$$

Чтобы получить окончательный результат применительно к нашей задаче, вычислим  $T_0$  и  $\Phi$ :

$$T_0 = \exp \left( 2\pi U \left( \frac{E}{k} + 1 \right) \right), \quad (41)$$

$$\begin{aligned} \Phi = 4qd - 8U \frac{E}{k} \operatorname{arcth} \left( \sqrt{\frac{-\kappa - E}{\kappa - E} \frac{U + dE - d\kappa}{U + dE + d\kappa}} \right) - \\ - 8U \operatorname{arcth} \left( \sqrt{\frac{U + dE - d\kappa}{U + dE + d\kappa}} \right). \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь

$$qd = \sqrt{(U + dE)^2 - (d\kappa)^2}.$$

Рисунок 2 демонстрирует высокую точность данного приближения, подтверждая квазиклассическую природу осцилляций коэффициента прохождения в интервале энергий  $-\kappa d > dE > -U + \kappa d$ .

Из формулы (40) можно сделать вывод о наличии квазистационарных состояний, энергии которых являются нулями коэффициента отражения. Ширина пика коэффициента прохождения характеризует ширину квазиуровня. Энергии квазистационарных состояний можно оценить из приближенного уравнения:  $\Phi = \pi/2 + 2\pi n$ , где  $n$  — целое число,  $\Phi$  — квазиклассическая фаза.

Рисунок 3 демонстрирует сильную зависимость коэффициента прохождения от параметра  $d$ .

### 3.2.6. Связанные состояния

Энергии связанных состояний являются полюсами коэффициента прохождения, т. е. определяются из уравнения

$$\begin{aligned} \frac{C_1}{C_2} = - \exp \left\{ \pi U \left( 1 - \frac{E}{k} \right) \right\} \times \\ \times \frac{\Gamma(-2iU)}{\Gamma(-iU(1 + E/k))}. \end{aligned} \quad (43)$$

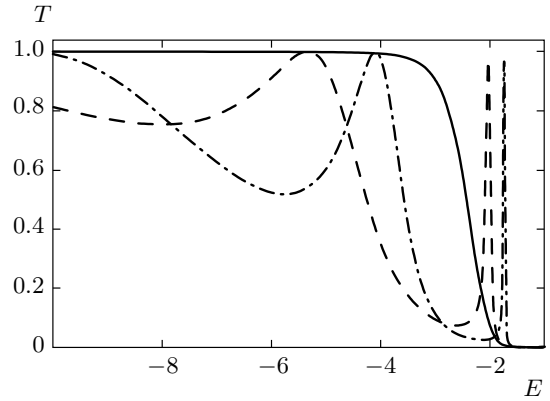


Рис. 3. Зависимости коэффициента прохождения  $T$  от  $E$  в области отрицательных энергий при  $\kappa = 1$ ,  $U = 2$  и различных значениях параметра  $d$ :  $d = 1$  (сплошная линия), 0.1 (штриховая), 0.05 (штрихпунктирная)

Энергия связанных состояний лежит в интервале  $\kappa > E > -\kappa$  при  $U > 2\kappa d$  или  $\kappa > E > -U/d + \kappa$  при  $U > 2\kappa d$ , что соответствует чисто мнимому значению  $k = \sqrt{E^2 - \kappa^2} = i\gamma$ .

Однако более удобно рассматривать другое условие для энергий связанных состояний, эквивалентное условию (43). Его можно получить из свойств симметрии уравнения Шредингера для частиц в симметричном потенциале. В четном потенциале,  $U(x) = U(-x)$ , волновая функция обладает свойством

$$\Psi(x) = e^{i\theta} \sigma_y \Psi(-x),$$

где  $\theta$  — произвольная фаза, определяемая условием сшивки в  $x = 0$ . Таким образом, плотность вероятности в данном состоянии  $\Psi$ , определяемая как  $\rho(x) = \Psi^\dagger(x)\Psi(x)$ , является симметричной функцией координаты  $x$ . Используя формулу (3) и данное свойство волновой функции, приходим к уравнению для энергий связанных состояний:

$$\left. \frac{d|g(x)|^2}{dx} \right|_{x=0} = 0. \quad (43a)$$

Физически это уравнение означает, что уровни энергий связанных состояний определяются условием гладкости плотности вероятности  $\rho(x)$  в нуле. Выберем такое решение уравнения (26), которое стремится к нулю на бесконечности, тогда при  $x > 0$  имеем

$$|g(x)| = e^{-\gamma x} G \left( \frac{iU(k - E)}{k}; 2iU; 2\gamma(d + x) \right).$$

Подстановка в (43а) дает точное уравнение для энергий связанных состояний, которое существенно проще анализировать, чем уравнение (43):

$$\operatorname{Re} \left\{ \left( 1 + i \frac{E}{\gamma} \right) \left( 1 + 2iU \times \frac{G \left( iU \left( 1 - \frac{E}{\gamma} \right) + 1; 2iU + 1; 2\gamma d \right)}{G \left( iU \left( 1 - \frac{E}{\gamma} \right); 2iU; 2\gamma d \right)} \right) \right\} = 0. \quad (43b)$$

Разложим уравнение (43b) при условии  $U \ll 1$ . Кроме того, потребуем малость коэффициента  $d$  для того, чтобы разложить гипергеометрические функции по их аргументу. Малость константы взаимодействия  $U$  соответствует нерелятивистскому рассмотрению, при котором  $E/\gamma \gg 1$ . Поэтому для того, чтобы найти энергии возбужденных уровней, не будем учитывать слагаемое  $(1 + iE/\gamma)$  в уравнении (43b). Тогда приходим к приближенному уравнению:

$$\operatorname{Re} \left\{ \frac{1}{\Gamma \left( 1 + U \left( i - \frac{E}{\gamma} \right) \right)} \left( \frac{1}{\Gamma \left( 1 - U \left( i + \frac{E}{\gamma} \right) \right)} - \frac{(2\gamma d)^{-2iU}}{\Gamma \left( 1 + U \left( i - \frac{E}{\gamma} \right) \right)} \right) \right\} = 0,$$

которое демонстрирует отсутствие сходимости при  $d \rightarrow 0$  из-за наличия осциллирующего фактора  $(2\gamma d)^{-2iU}$ . Порядок параметра  $d$ , при котором фаза осциллирующего множителя будет порядка единицы, определяется экспоненциально малым множителем  $\exp(-1/2U)$ . Однако в действительности  $d$  не может принимать сколь угодно малые значения вследствие экранировки потенциала электронами. Поэтому для дальнейших вычислений будем считать, что

$$(2\gamma d)^{-2iU} \approx 1 - 2iU \ln(2\gamma d), \quad d \gg \exp \left( -\frac{1}{2U} \right).$$

Оставляя в разложении только главный порядок, приходим к уравнению

$$\operatorname{Re} \left\{ \Gamma \left( 1 + U \left( i - \frac{E}{\gamma} \right) \right) \right\} = 0.$$

При условии  $U \ll 1$  последнее уравнение верно только в полюсах гамма-функции, откуда получаем, что

$$\frac{E}{\gamma} = \frac{n}{U},$$

или

$$E = \kappa - \frac{\kappa U^2}{2n^2}.$$

Данной энергии соответствуют две волновые функции — имеет место двукратное вырождение. Рассматривая следующий порядок по  $U$  в представленном разложении, определим поправки к уровням энергии:

$$E_1 = \kappa - \frac{\kappa U^2}{2n^2} - \frac{\kappa U^2}{n^2 \ln(2\kappa U d)},$$

$$E_2 = \kappa - \frac{\kappa U^2}{2n^2} + \frac{\kappa U^4}{n^3} \ln(2\kappa U d).$$

Здесь предполагалось выполнение условия

$$\exp \left( -\frac{1}{2U} \right) \ll \kappa d \ll U.$$

Энергия основного состояния получается в приближении  $UE/\gamma \ll 1$ ,  $E/\gamma \gg 1$  из уравнения (43b):

$$E_0 = \kappa - 2\kappa U^2 \ln^2(2\kappa U d).$$

Рассмотрим также случай  $U \gg 1$ . Энергии связанных состояний определяются приближенным уравнением

$$\frac{E}{\gamma} \frac{\pi - \operatorname{arccctg}(E/\gamma)}{\pi} + \frac{1}{12\pi} \left( \frac{\gamma}{\kappa U} \right)^2 = \frac{n}{2U} - \frac{1}{\pi} \ln \frac{2U}{e\kappa d} - \frac{1}{4U} \frac{\pi - \operatorname{arctg}(1/6U)}{\pi}, \quad (44)$$

где  $e = 2.718\dots$ ,  $n$  — целое число. Условия применимости данного уравнения следующие:  $U \gg 1$ ,  $\gamma d \ll 1$ . При этом слагаемое

$$\frac{1}{12\pi} \left( \frac{\gamma}{\kappa U} \right)^2 \ll \frac{1}{12\pi} \ll 1,$$

поэтому для дальнейшего анализа его можно опустить. Будем также считать, что  $d$  достаточно мало и выполняется условие  $\kappa d \lesssim 1$ . В этом случае уравнение (44) справедливо во всей области энергий  $\kappa > E > -\kappa$ . Функция

$$\frac{E}{\gamma} \frac{\pi - \operatorname{arccctg}(E/\gamma)}{\pi},$$

где  $\gamma = \sqrt{\kappa^2 - E^2}$ , ограничена снизу, причем

$$\frac{E}{\gamma} \frac{\pi - \operatorname{arccctg}(E/\gamma)}{\pi} \geq -\frac{1}{\pi}.$$

Отсюда следует условие для  $n$ :

$$n \geq \left[ \frac{2U}{\pi} \ln \frac{2U}{e^2 \kappa d} + \frac{\pi - \operatorname{arctg}(1/6U)}{2\pi} \right] + 1 = n_0.$$

Здесь  $[x]$  — целая часть вещественного числа  $x$ . Проведем замену  $n = n_0 + m$ , где  $m = 0, 1, 2, \dots$ . Тогда приходим к следующему уравнению для энергий связанных состояний:

$$\frac{E}{\sqrt{\kappa^2 - E^2}} \frac{\pi - \operatorname{arctg} \frac{E}{\sqrt{\kappa^2 - E^2}}}{\pi} + \frac{1}{\pi} = \frac{m + \alpha}{2U}, \quad (45)$$

где

$$\alpha = 1 - \left\{ \frac{2U}{\pi} \ln \frac{2U}{e^2 \kappa d} + \frac{\pi - \operatorname{arctg}(1/6U)}{2\pi} \right\},$$

$\{x\}$  — дробная часть вещественного числа  $x$ .

Из формулы (45) следуют несколько признаков подобия. Первый признак состоит в том, что при фиксированных  $\kappa$  и  $U$  дискретный спектр определяется только параметром  $\alpha$ . Значит, дискретный спектр задачи с

$$d_n = d_0 \exp\left(-\frac{\pi n}{2U}\right),$$

где  $n$  — целое число, эквивалентен дискретному спектру с параметром задачи  $d_0$ , так как в этом случае  $\alpha_n = \alpha_0$ . Второй признак подобия появляется при рассмотрении нормированной энергии  $\varepsilon = E/\kappa$ . Тогда правая часть уравнения зависит только от  $\varepsilon$ , а левая — от  $U$  и  $\alpha$ . Фиксируя  $U$  и  $d$ , получим, что в терминах нормированной энергии дискретный спектр задачи с

$$\kappa_n = \kappa_0 \exp\left(\frac{\pi n}{2U}\right),$$

где  $n$  — целое число, эквивалентен дискретному спектру с параметром задачи  $\kappa_0$ , так как в этом случае  $\alpha_n = \alpha_0$ . Имеем

$$\frac{\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}} \frac{\pi - \operatorname{arctg} \frac{\varepsilon}{\sqrt{1 - \varepsilon^2}}}{\pi} + \frac{1}{\pi} = \frac{m + \alpha}{2U}, \quad (46)$$

где  $m = 0, 1, 2, \dots$

При  $U \gg 1$  можно приближенно оценить энергию основного состояния с  $m = 0$ :

$$\varepsilon_0 \approx -1 + \frac{3\pi\alpha}{4U}. \quad (47)$$

Асимптотика при больших значениях  $m$  включает в себя только параметр  $U$ . Дискретный спектр при больших  $m$ ,

$$\varepsilon_m = 1 - \frac{2U^2}{m^2},$$

совпадает с кулоновским спектром.

На рис. 4 приведены графики плотности вероятности для первых трех уровней.

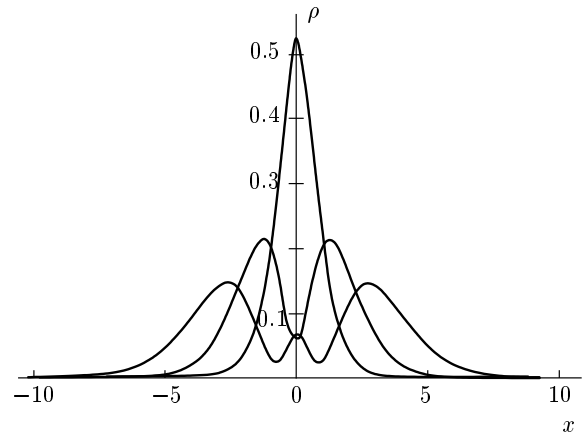


Рис. 4. Плотность вероятности трех первых связанных состояний в кулоновском потенциале  $U(x) = -U/(|x| + d)$  при  $U = 2$ ,  $d = 1$ ,  $\kappa = 1$ :  $E_0 = -0.124042$ ,  $E_1 = 0.431406$ ,  $E_2 = 0.628305$

#### 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение перечислим полученные в работе результаты. Нами рассмотрены состояния электрона в однослойном графене в присутствии одномерного потенциала. Построена теория возмущений по величине поперечного импульса частицы  $\kappa$  и квазиклассическое приближение. Аналитически решены задачи о прохождении через ступеньку в форме гиперболического тангенса  $U(x) = U \operatorname{th}(x/a)$  и о движении электрона в одномерном кулоновском потенциале  $U(x) = -U/(|x| + d)$ . В этих задачах найдены коэффициенты прохождения, фазы прохождения и отражения, рассмотрены различные приближения и качественные оценки.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-00730) и Программы РАН.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. K. S. Novoselov et al., Science **306**, 666 (2004).
2. A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nature Materials **6**(3), 183 (2007).
3. V. Ryzhii, M. Ryzhii et al., arXiv:cond-mat/0801.1543.
4. L. M. Zhang and M. M. Fogler, arXiv:cond-mat/0708.0892.
5. N. Vandecasteele, A. Barreiro, M. Lazzeri et al., arXiv:cond-mat/1003.2072.

6. N. Stander, B. Huard, and D. Goldhaber-Gordon, arXiv:cond-mat/0806.2319.
7. Debdeep Jena, Tian Fang et al., arXiv:cond-mat/0806.0139.
8. Т. Я. Тудоровский, А. В. Чаплик, Письма в ЖЭТФ **84**, 735 (2006).
9. V. V. Cheianov and V. I. Falko, Phys. Rev. B **74**, 041403 (2006).
10. H. Bahloulia, E. B. Choubabia et al., arXiv:cond-mat/1105.5279.
11. S. Kuru, J. Negro, and L. M. Nieto, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 455305 (2009).
12. T. K. Ghosh, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 045505 (2009).
13. E. Milpas, M. Torres, and G. Murguía, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 245304 (2011).
14. V. Hung Nguyen, A. Bournell, and P. Dollfus, arXiv:cond-mat/1105.1283.
15. R. R. Hartmann and M. E. Portnoi, *Optoelectronic Properties of Carbon-based Nanostructures: Steering Electrons in Graphene by Electromagnetic Fields*, Lambert Acad. Publ., Saarbrücken, Germany (2011).
16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (Нерелятивистская теория)*, т. 3, Наука, Москва (1974), с. 752.