

## КУЛОНОВСКАЯ ЗАДАЧА ПРИ $Z > Z_{cr}$ В ДОПИРОВАННОМ ГРАФЕНЕ

В. М. Кулешов<sup>a\*</sup>, В. Д. Мур<sup>a</sup>, А. М. Федотов<sup>a</sup>, Ю. Е. Лозовик<sup>a,b</sup>

<sup>a</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
115409, Москва, Россия

<sup>b</sup> Институт спектроскопии Российской академии наук  
142190, Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 17 декабря 2016 г.

В рамках эффективного двумерного уравнения Дирака рассматривается динамика носителей заряда в допированном, т. е. с зависящей от подложки величиной щели в энергетическом спектре, графене в присутствии кулоновской примеси с зарядом  $Z$ . Для модифицированного на малых расстояниях кулоновского потенциала определены волновые функции носителей с сохраняющимся угловым моментом  $J = M + 1/2$ . В рассматриваемом случае, как и в любой двумерной физической системе, возможно как целое, так и полуцелое квантование орбитального момента в плоскости,  $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Для  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1$  вычислены критические значения эффективного заряда  $Z_{cr}(J, n)$ , при которых уровень с угловым моментом  $J$  и радиальными квантовыми числами  $n = 0$  и  $n = 1$  достигает верхней границы валентной зоны. При  $Z < Z_{cr}(J, n = 0)$  для низших значений орбитального момента  $M$  приведена зависимость энергии уровня от заряда  $Z$ , причем уровень с  $J = 0$  первым опускается до границы зоны. При  $Z > Z_{cr}(J, n = 0)$  вычислены фазы рассеяния как функции энергии дырок при нескольких значениях надкритичности, а также положения  $\varepsilon_0$  и ширины  $\gamma$  квазистационарных состояний как функций надкритичности. Указаны значения  $\varepsilon_0^*$  и ширины  $\gamma^*$ , при которых квазидискретные уровни могут проявляться как брейт-вигнеровские резонансы в рассеянии дырок на закритической примеси. В силу вещественности фаз парциальная матрица рассеяния унитарна, так что радиальное уравнение Дирака непротиворечиво и при  $Z > Z_{cr}$ . В этом одночастичном приближении спонтанное рождение электрон-дырочных пар отсутствует и экранировка заряда примеси за счет такого механизма не может реализоваться.

DOI: 10.7868/S0044451017120197

### 1. ВВЕДЕНИЕ

Структура графена, его замечательные электронные свойства и их различные физические приложения подробно обсуждены в обзоре [1]. Элементарная ячейка однослойного графена содержит два атома углерода, принадлежащих двум подрешеткам,  $A$  и  $B$ , которые образуют гексагональную решетку (медовые соты). Два ее неэквивалентных угла,  $K$  и  $K'$  (так называемые дираковские точки), являются выделенными в зоне Бриллюэна. Вблизи них энергия и электронные волновые функции определяются эффективным двумерным уравнением Дирака. В зависимости от подложки элементарным возбуждениям отвечают безмассовые (бесщеле-

вое уравнение) и массивные фермионы (уравнение Дирака со щелью в электронном спектре).

Так, например, в работе [2] на основании данных по угловому разрешению фотоэлектронов показано, что закон дисперсии квазичастиц вблизи дираковской точки  $K$  в графене, выращенном на подложке SiC, подобен зависимости энергии от импульса массивной релятивистской частицы. В этом случае щель в спектре возникает вследствие взаимодействия между слоем графена и подложкой — допированный графен. Это взаимодействие нарушает симметрию между решетками  $A$  и  $B$ , но сохраняет трансляционную симметрию. Величину щели можно менять, варьируя химический состав и концентрацию подложки (см., например, работы [3,4], в последней из которых обсуждается  $BN$ -допированный графен). В этом случае симметрия подрешеток нарушается  $B$ - и  $N$ -атомами и величина щели в спектре может изменяться в достаточно широкой обла-

\* E-mail: kuleshov.val@gmail.com

сти в зависимости от их концентрации (см. рис. 3 в работе [4]).

В присутствии многозарядной примеси дополнительный интерес представляет именно этот случай, поскольку энергетический спектр аксиально-симметричной двумерной гетероструктуры полностью аналогичен спектру сферически-симметричной трехмерной задачи [5]. Хорошо известно [6], что в этой задаче модель точечного кулоновского потенциала теряет смысл при  $Z > \alpha^{-1} \simeq 137$ , где  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры Зоммерфельда. В графене ее аналогом является величина  $\alpha_F \sim 1$ , так что уже при значении эффективного заряда  $Z \gtrsim 1$  требуется регуляризация кулоновского потенциала на малых расстояниях. В трехмерном случае это достигается за счет учета конечного радиуса ядра [7], а в графене — за счет размера примеси, причем радиус «обрезания» кулоновского потенциала должен быть много больше размера элементарной ячейки, чтобы был возможен переход к непрерывному описанию с помощью эффективного уравнения Дирака (см. ниже неравенства (24)). При этом при увеличении заряда дискретный уровень углубляется, и при некотором критическом значении [7]  $Z = Z_{cr}$  он достигает границы нижнего континуума решений уравнения Дирака.

В работе [8] рассматривается влияние сверхзаряженной,  $Z > Z_{cr}$ , кулоновской примеси на систему двумерных массивных дираковских частиц в допированном графене. В ней обсуждается, в частности, экранировка заряда примеси электронами, рождаемыми вместе с дырками из моря Дирака, в полной аналогии со спонтанным рождением электрон-позитронных пар при  $Z > Z_{cr}$  в трехмерной задаче [9–11]. Однако, как показано в работе [12], одночастичное приближение для уравнения Дирака справедливо не только при  $Z \leq Z_{cr}$ , но также и при  $Z > Z_{cr}$ , так что спонтанное рождение  $e^+e^-$ -пар из вакуума отсутствует. Аналогичное утверждение относится к двумерному эффективному уравнению Дирака со щелью в электронном спектре, так что указанный в работе [8] механизм экранировки заряда согласно сценарию, описанному в обзоре [11], не может реализоваться [13].

Заклучение об отсутствии спонтанного рождения частиц-античастиц в кулоновском потенциале при  $Z > Z_{cr}$  основывается на унитарности парциальной матрицы рассеяния [12, 13]. Упругое рассеяние в графене подробно обсуждается в работе [14]. Однако в ней рассматривается докритический случай,  $Z < Z_{cr}$ . В настоящей работе мы, наоборот, сосредоточимся в основном на вычислении волновых

функций и фаз рассеяния в нижнем континууме в закритической области, т. е. при  $Z > Z_{cr}$ .

Следует отметить, что во всех известных нам статьях, посвященных свойствам двумерного уравнения Дирака, в том числе и в работах [8, 14], предполагается, что орбитальный момент может принимать только целые значения (в единицах  $\hbar$ ). Однако в двумерном случае возможно и дробное квантование орбитального момента,  $M = 0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$  [15, 16]. Поэтому в графене полный угловой момент [17]  $J = M + 1/2$  может принимать как полуцелые, так и целые значения, включая нуль. В частности, основной уровень в допированном графене с кулоновской примесью отвечает именно этому значению полного углового момента.

В следующем разделе рассматриваются свойства радиального двумерного уравнения Дирака при всех возможных значениях полного момента  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$ . Обсуждаются, в частности, условия, при которых радиальный дираковский гамильтониан  $H_D$  становится самосопряженным оператором, а в разд. 3 формулируются граничные условия для двумерной кулоновской задачи. В разд. 4 эти граничные условия конкретизируются в соответствии с работой [7] для «прямоугольного обрезания» кулоновского потенциала на малых расстояниях при любых значениях эффективного заряда  $Z$  примеси и углового момента  $J \neq 0$ . Показано, что при специфическом для двумерного случая значении  $J = 0$  аналитическое решение радиального уравнения Дирака возможно при любой модификации кулоновского потенциала. Это утверждение справедливо и в бесщелевом случае.

В разд. 5 обсуждается дискретный спектр двумерной кулоновской задачи с короткодействием. Вычисляются зависимость энергии уровня с заданным  $J$  от заряда и критические значения заряда  $Z = Z_{cr}(J, n)$ , при которых уровень с угловым моментом  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1$  и радиальным квантовым числом  $n = 0$  и  $n = 1$  достигает границы нижнего континуума, т. е. верхней границы валентной зоны. Волновые функции и квазистационарные состояния дырок, отвечающие гамовским волновым функциям, рассмотрены в разд. 6. Раздел 7 посвящен резонансному рассеянию дырок на закритической примеси. Вычислены парциальные фазы рассеяния как функции энергии дырок при  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1$  и при нескольких значениях надкритичности. Вещественность фаз означает унитарность парциальных матриц рассеяния, что эквивалентно отсутствию неупругих каналов, в частности, спонтанного рождения электрон-дырочных пар. Указаны значения

положений  $\varepsilon_0^*$  и ширин  $\gamma^*$  квазидискретных уровней, при которых они могут проявиться как брейт-вигнеровские резонансы в рассеянии дырок на закритической примеси. Заключительные замечания приведены в разд. 8. Отмечен, в частности, существенно другой характер зависимости от энергии парциальной фазы рассеяния дырки с угловым моментом  $J = 0$  на сверхзаряженной примеси в бесщелевом графене по сравнению с резонансным рассеянием на закритической примеси в графене со щелью в энергетическом спектре при малой надкритичности. Поэтому на основе экспериментальных данных по спектрам вольт-амперных характеристик можно установить, реализуются ли в допированном графене состояния с четным угловым моментом  $J$ , в частности с  $J = 0$ . Граничные условия на бесконечности рассматриваются в Приложении А. Мелкие уровни с полным угловым моментом  $J$  обсуждаются в Приложении В, причем особое внимание уделено специфическому для двумерной задачи случаю  $J = 0$ , отвечающему орбитальному моменту  $M = -1/2$ . Дробному квантованию орбитального момента, возможному в двумерном случае, посвящено Приложение С. Предварительные результаты опубликованы в кратких сообщениях [12, 13].

## 2. ДВУМЕРНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИРАКА ВО ВНЕШНЕМ АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ

Динамика массивных фермионов в примесном графене в непрерывном пределе описывается эффективным двумерным уравнением Дирака во внешнем аксиально-симметричном скалярном потенциале  $U(|\mathbf{x}|)$ , исчезающем на бесконечности:

$$\left( -i\hbar v_F \boldsymbol{\sigma} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} + U(|\mathbf{x}|) + m_* v_F^2 \sigma_z \right) \psi_E(\mathbf{x}) = E \psi_E(\mathbf{x}), \quad (1)$$

см., например, работы [8, 14] и указанные там дальнейшие ссылки. Здесь  $v_F$  — скорость на поверхности Ферми,  $\mathbf{x} = (x, y)$ ,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$  и  $\sigma_z$  — матрицы Паули,  $m_*$  — эффективная масса электрона,  $\psi_E(\mathbf{x})$  — двухкомпонентная волновая функция, отвечающая энергии  $E$ .

В силу аксиальной симметрии сохраняющимся квантовым числом является полный угловой момент  $\hbar J = \hbar(M + 1/2)$ , т. е. собственное значение генератора двумерных вращений  $-i\hbar \partial / \partial \varphi + \hbar \sigma_z / 2$  [17]. Орбитальный момент  $\hbar M$  является собственным значением самосопряженного оператора  $-i\hbar \partial / \partial \varphi$ , дей-

ствующего в гильбертовом пространстве квадратично интегрируемых на окружности  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$  функций с граничным условием [15, 16]

$$\Phi(2\pi) = e^{i\theta} \Phi(0), \quad \theta = 2\pi\delta, \quad \text{Im } \delta = 0, \quad (2)$$

где  $\theta$  — топологическая фаза Паули.

Разрыв непрерывности<sup>1)</sup> при  $\varphi = 2\pi$  связан с тем, что окружность является дифференцируемым многообразием [18], атлас которого состоит по крайней мере из двух карт (в стереографической проекции). Полный атлас, т. е. совокупность всех атласов, восстанавливает кажущееся нарушение аксиальной симметрии.

При обращении времени орбитальный момент меняет знак, поэтому топологическая фаза Паули может принимать только два значения,  $\theta = 0$  и  $\theta = \pi$  [19], что приводит к его полуцелому<sup>2)</sup> квантованию. Тогда, в силу граничного условия (2), собственные функции оператора  $-i\hbar \partial / \partial \varphi$  равны

$$\Phi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi}, \quad M = \delta + m, \quad (3)$$

$$\delta = 0, \frac{1}{2}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Они реализуют неприводимые однозначные при  $\delta = 0$  и двузначные при  $\delta = 1/2$  представления группы вращений  $SO(2)$ .

Полагая

$$E = m_* v_F^2 \varepsilon, \quad U(|\mathbf{x}|) = m_* v_F^2 V(\rho), \quad (4)$$

$$\mathbf{x} = l_F \boldsymbol{\rho}, \quad \boldsymbol{\rho} = (\rho \cos \varphi, \rho \sin \varphi),$$

где  $l_F = \hbar / m_* v_F$  — «комптоновская» длина в графене, для волновой функции с заданным полным угловым моментом  $J$  получаем

$$\psi_{\varepsilon, J}(\boldsymbol{\rho}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} e^{iJ\varphi} \begin{pmatrix} e^{-i\varphi/2} F(\rho) \\ i e^{i\varphi/2} G(\rho) \end{pmatrix}, \quad J = M + \frac{1}{2}. \quad (5)$$

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

$$H_D \Psi_{\varepsilon, J}(\rho) = \varepsilon \Psi_{\varepsilon, J}(\rho), \quad \Psi_{\varepsilon, J} = \begin{pmatrix} F(\rho) \\ G(\rho) \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$H_D = \begin{pmatrix} 1 + V(\rho) & \frac{J}{\rho} + \frac{d}{d\rho} \\ \frac{J}{\rho} - \frac{d}{d\rho} & -1 + V(\rho) \end{pmatrix},$$

<sup>1)</sup> Требование непрерывности волновых функций не следует, вообще говоря, из общих принципов квантовой теории.

<sup>2)</sup> Полуцелое квантование орбитального момента, возможное в двумерных физических системах, реализуется, например, в циркулярных квантовых точках с нечетным числом электронов [20, 21].

которое с точностью до обозначений<sup>3)</sup> совпадает с системой уравнений для радиальных функций в трехмерной задаче [5]. Однако в двумерном случае возможно значение  $J = 0$ , а также полуцелые значения  $J = m + 1/2$ ,  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Электронные свойства графена на подложке SiC, допированного атомными ядрами или ионами с зарядом  $Z_0$ , описываются, согласно работам [2, 8], уравнением (6) с кулоновским потенциалом притяжения

$$V_C(\rho) = -\frac{q}{\rho}, \quad q = Z\alpha_F, \quad \alpha_F = \frac{e^2}{\hbar v_F}, \quad q > 0. \quad (7)$$

Здесь эффективный заряд  $Z = Z_0/\epsilon$ , где  $Z_0$  — «голый» заряд примеси, а  $\epsilon$  — эффективная диэлектрическая проницаемость. Для указанных в работах [2, 8] значений величины щели  $\Delta = 2m_*v_F^2 = 0.26$  эВ, эффективной константы связи  $\alpha_F = 0.4$  и расстояния между ядрами углерода  $a_{CC} = 1.42$  Å имеем

$$v_F = 5.53 \cdot 10^8 \text{ см/с}, \quad m_* = 7.65 \cdot 10^{-4} m_e, \quad (8)$$

$$l_F = 271 \text{ Å},$$

где  $m_e$  — масса электрона, так что  $l_F \gg a_{CC}$  и оправдан переход к непрерывному пределу.

Задача поставлена, если наряду с уравнением (6) указаны подходящие граничные условия. В рассматриваемом случае это означает, что ассоциированный с дифференциальным оператором  $H_D$  оператор  $H$  должен быть самосопряженным оператором, действующим в гильбертовом пространстве  $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2(R_+)$  квадратично интегрируемых на вещественной полупрямой  $R_+ = [0, \infty)$  функций с эрмитовым скалярным произведением

$$(\Psi_2, \Psi_1) = \int_0^\infty \Psi_2^\dagger(\rho)\Psi_1(\rho) d\rho = \int_0^\infty (F_2^*F_1 + G_2^*G_1) d\rho \quad (9)$$

и нормой

$$(\Psi, \Psi) \equiv \|\Psi\|^2 = \int_0^\infty (|F(\rho)|^2 + |G(\rho)|^2) d\rho < \infty. \quad (10)$$

Для потенциалов, убывающих на бесконечности,  $V(\rho) \rightarrow 0$  при  $\rho \rightarrow \infty$ , значениям безразмерной энергии  $\varepsilon \geq 1$  отвечает верхний континуум решений двумерного уравнения Дирака, значениям  $\varepsilon \leq -1$  —

<sup>3)</sup> Уравнение (6) совпадает с системой (10.1.4) из [5] после замен  $F \rightarrow rg$ ,  $G \rightarrow -rf$ ,  $J \rightarrow -\varkappa$ , где  $\varkappa = \pm 1, \pm 2, \dots$  — дираковское квантовое число.

нижний континуум, а области  $-1 < \varepsilon < 1$  — дискретный спектр. Поскольку собственные значения оператора  $H_D$  сколь угодно велики, оператор  $H$  является неограниченным оператором и необходимо указать область его определения  $\mathcal{D}(H)$  [22].

В соответствии с теорией фон Неймана для таких операторов, минимально необходимым требованием для любого линейного оператора  $H$ , связанного с  $H_D$  и действующего в гильбертовом пространстве  $\mathcal{L}_2(R_+)$ , являются условия

$$H\Psi = H_D\Psi, \quad \mathcal{D}(H) = \{\Psi \in \mathcal{L}_2(R_+), H_D\Psi \in \mathcal{L}_2(R_+)\}. \quad (11)$$

Для гамильтониана (6) эти условия приводят к убыванию волновой функции  $\Psi$  на бесконечности,

$$F(\infty) = G(\infty) = 0, \quad (12)$$

см. Приложение А.

Интегрируя по частям и учитывая убывание волновой функции на бесконечности, получаем

$$\int_0^\infty \Psi_2^\dagger(H_D\Psi_1) d\rho - \int_0^\infty (H_D\Psi_2)^\dagger\Psi_1 d\rho = \lim_{\rho \rightarrow 0} [F_1(\rho)G_2^*(\rho) - F_2^*(\rho)G_1(\rho)]. \quad (13)$$

Для самосопряженного оператора внеинтегральное слагаемое, т. е. правая часть этого равенства, должно исчезать. Таким образом, ответ на вопрос, является ли оператор  $H$ , ассоциированный с дифференциальным оператором  $H_D$ , самосопряженным или нет, полностью определяется асимптотикой волновых функций на малых расстояниях, точнее их поведением в пределе  $\rho \rightarrow 0$ , и, следовательно, формой потенциала на малых расстояниях.

### 3. ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ В ДВУМЕРНОЙ КУЛОНОВСКОЙ ЗАДАЧЕ

Радиальные функции двумерного уравнения Дирака с кулоновским потенциалом (7) удовлетворяют системе уравнений

$$\frac{dF}{d\rho} - \frac{J}{\rho}F + \left(1 + \varepsilon + \frac{q}{\rho}\right)G = 0, \quad (14)$$

$$\frac{dG}{d\rho} + \frac{J}{\rho}G + \left(1 - \varepsilon - \frac{q}{\rho}\right)F = 0,$$

где полный момент  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2, \pm 2, \dots$

Решения  $\Psi_{\varepsilon, J}(\rho)$  этой системы являются собственными функциями гамильтониана  $H$ , соответствующими собственному значению  $\varepsilon$ , и образуют

полную систему тогда и только тогда, когда оператор  $H$  является самосопряженным. При этом, согласно равенству (13), необходимы граничные условия при  $\rho = 0$ . Чтобы их получить, нужно рассмотреть асимптотику решений системы (14) на малых расстояниях, которая для релятивистской кулоновской задачи обсуждается в работе Кейза [23], а также в монографии [22].

В пределе  $\rho \rightarrow 0$  такая асимптотика определяется значением только одного параметра  $\sigma = \sqrt{J^2 - q^2}$ . При заданном значении полного момента  $J$  эта асимптотика меняется с увеличением заряда.

1. Пусть сначала  $0 < q < \sqrt{J^2 - \sigma^2}$ . Тогда нетрудно проверить, что

$$\begin{aligned} \Psi_\sigma(\rho \rightarrow 0) &= \\ &= C_\sigma \left\{ u_\sigma \begin{pmatrix} 1 \\ g_\sigma \end{pmatrix} \rho^\sigma + u_{-\sigma} \begin{pmatrix} 1 \\ g_{-\sigma} \end{pmatrix} \rho^{-\sigma} \right\}, \quad (15) \\ qg_{\pm\sigma} &= J \mp \sigma, \quad \sigma = \sqrt{J^2 - q^2} > 0. \end{aligned}$$

Подставляя это разложение в правую часть равенства (13) и учитывая, что для самосопряженного оператора  $\mathcal{D}(H^\dagger) = \mathcal{D}(H)$ , получим

$$\begin{aligned} \frac{u_\sigma}{u_{-\sigma}} &= \left( \frac{u_\sigma}{u_{-\sigma}} \right)^* = \text{tg } \theta_\sigma, \quad (16) \\ -\frac{\pi}{2} &\leq \theta_\sigma \leq \frac{\pi}{2}, \quad \sigma < |J|. \end{aligned}$$

Это граничное условие определяет однопараметрическое семейство самосопряженных операторов

$$\begin{aligned} H_{\theta_\sigma} \Psi &= H_D \Psi, \quad (17) \\ \mathcal{D}(H_{\theta_\sigma}) &= \{ \Psi \in \mathcal{L}_2(R_+), H_D \Psi \in \mathcal{L}_2(R_+); \theta_\sigma \}, \end{aligned}$$

где  $\theta_\sigma$  определено в (16).

Чтобы удовлетворить первому из условий (11) при  $1/2 \leq \sigma < |J|$ , нужно положить  $u_{-\sigma} = 0$ , что отвечает значению параметра  $\theta_\sigma = \pm\pi/2$ . При этом правая часть равенства (13) обращается в нуль автоматически и оператор  $H$  является самосопряженным. В этой области изменения заряда  $q$  одни только требования (11) реализуют так называемое «встроенное» граничное условие [22].

2. В особом случае  $q^2 \equiv q_s^2 = J^2$  справедливо разложение, в котором появляются логарифмы,

$$\begin{aligned} \Psi_0(\rho \rightarrow 0) &= C_0 \left\{ u_0 \begin{pmatrix} 1 \\ g_0 \end{pmatrix} + \tilde{u}_0 \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{g}_0 \end{pmatrix} \ln \rho \right\}, \quad (18) \\ qg_0 &= J - \frac{\tilde{u}_0}{u_0}, \quad q\tilde{g}_0 = J. \end{aligned}$$

Действуя так же, как и в предыдущей области изменения  $q$ , имеем

$$\begin{aligned} \frac{u_0}{\tilde{u}_0} &= \left( \frac{u_0}{\tilde{u}_0} \right)^* = \text{tg } \theta_0, \quad (19) \\ -\frac{\pi}{2} &\leq \theta_0 \leq \frac{\pi}{2}, \quad \sigma = 0. \end{aligned}$$

Это граничное условие определяет семейство самосопряженных операторов  $H_{\theta_0}^\dagger = H_{\theta_0}$ , ср. с соотношением (17).

3. Если же  $q^2 > J^2$ , то вместо (15) получаем разложение

$$\begin{aligned} \Psi_\tau(\rho \rightarrow 0) &= \\ &= C_\tau \left\{ u_\tau \begin{pmatrix} 1 \\ g_\tau \end{pmatrix} \rho^{i\tau} + u_{-\tau} \begin{pmatrix} 1 \\ g_{-\tau} \end{pmatrix} \rho^{-i\tau} \right\}, \quad (20) \\ qg_{\pm\tau} &= J \mp i\tau, \quad \tau = \sqrt{q^2 - J^2} = -i\sigma. \end{aligned}$$

Оно приводит к граничному условию

$$\begin{aligned} \left( \frac{u_\tau}{u_{-\tau}} \right)^* &= \left( \frac{u_\tau}{u_{-\tau}} \right)^{-1}, \quad \frac{u_\tau}{u_{-\tau}} = e^{2i\theta_\tau}, \quad (21) \\ \text{Im } \theta_\tau &= 0 \end{aligned}$$

и, соответственно, к семейству самосопряженных операторов при  $q > |J|$ ,

$$\begin{aligned} H_{\theta_\tau} \Psi &= H_D \Psi, \quad (22) \\ \mathcal{D}(H_{\theta_\tau}) &= \{ \Psi \in \mathcal{L}_2(R_+), H_D \Psi \in \mathcal{L}_2(R_+); \theta_\tau \}. \end{aligned}$$

Однопараметрические семейства самосопряженных радиальных дираковских операторов  $H_{\theta_\sigma}$  и  $H_{\theta_\tau}$  были получены ранее другим способом в работах [24,25] для целых значений полного углового момента  $J = \pm 1, \pm 2, \dots$  в трехмерной задаче и в работе [26] для  $J = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$  в двумерном случае.

Указанные в пп. 1–3 граничные условия определяют полный набор волновых функций и энергетический спектр двумерной кулоновской задачи (14) при всех значениях полного углового момента (включая  $J = 0$ ) и заряда  $q$  примеси.

#### 4. ДВУМЕРНАЯ КУЛОНОВСКАЯ ЗАДАЧА С КОРОТКОДЕЙСТВИЕМ

Равенства (16), (19) и (21) определяют необходимые граничные условия для решения системы (14) при всех значениях заряда  $q > \sqrt{J^2 - 1/4}$ . Чтобы фиксировать параметры  $\theta_\sigma(J)$  и  $\theta_\tau(J)$ , т. е. выделить конкретный самосопряженный гамильтониан из однопараметрических семейств (17) и (22), требуются дополнительные физические соображения.

Согласно Померанчуку и Смородинскому [7], «представляет интерес исследование поведения уровней энергии в системе с конечным радиусом». В дальнейшем будем рассматривать кулоновский потенциал, модифицированный на малых расстояниях  $\rho \leq R \ll 1$ :

$$V_R(\rho) = -\frac{q}{R} \begin{cases} R/\rho, & \rho \geq R, \\ f(\rho/R), & \rho \leq R. \end{cases} \quad (23)$$

В нашем случае в соответствии с (8) получаем

$$1 \gg R \gg \frac{a_{CC}}{l_F} \simeq 5.2 \cdot 10^{-3}. \quad (24)$$

Уравнение (6) с заменой  $V(\rho) \rightarrow V_R(\rho)$  имеет аналитическое решение для  $f(\rho/R) \equiv 1$ , т. е. для «прямоугольного» обрезания [7] кулоновского потенциала. В этой модели при  $\rho < R$ , т. е. на малых расстояниях, для  $J \neq 0$  имеем

$$\Psi_J(\rho) = C_J \left(q \frac{\rho}{R}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} \pm J_{\pm(J-1/2)} \left(q \frac{\rho}{R}\right) \\ J_{\pm(J+1/2)} \left(q \frac{\rho}{R}\right) \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Здесь  $J_\nu(z)$  — функции Бесселя [27], а верхние (нижние) знаки в индексах относятся к значениям полного момента  $J > 0$  ( $J < 0$ ).

Сравнение этого выражения с асимптотической структурой (15) с учетом непрерывности двухкомпонентной волновой функции при  $\rho = R$  дает

$$\begin{aligned} \operatorname{tg} \theta_\sigma(J; R) &= \frac{\sigma + J}{\sigma - J} \times \\ &\times \frac{[qJ_{\pm(J-1/2)}(q) \pm (\sigma - J)J_{\pm(J+1/2)}(q)]R^{-\sigma}}{[qJ_{\pm(J-1/2)}(q) \mp (\sigma + J)J_{\pm(J+1/2)}(q)]R^\sigma}, \quad (26) \\ \sigma &= \sqrt{J^2 - q^2} > 0, \end{aligned}$$

где верхние (нижние) знаки, так же как и в (25), отвечают значениям  $J > 0$  ( $J < 0$ ). Если же  $q > |J|$ , то, в соответствии с (21), приходим к равенству

$$\begin{aligned} \exp[2i\theta_\tau(J; R)] &= \frac{i\tau + J}{i\tau - J} \times \\ &\times \frac{[qJ_{\pm(J-1/2)}(q) \pm (i\tau - J)J_{\pm(J+1/2)}(q)]R^{-i\tau}}{[qJ_{\pm(J-1/2)}(q) \mp (i\tau + J)J_{\pm(J+1/2)}(q)]R^{i\tau}}, \quad (27) \\ \tau &= \sqrt{q^2 - J^2} > 0. \end{aligned}$$

Граничные условия (16) и (21) совместно с выражениями (26) и (27) определяют решения системы (14) при всех значениях<sup>4)</sup> заряда  $q$  и полного момента  $J$ , кроме значения  $J = 0$ .

<sup>4)</sup> Особый случай  $q = J$ , когда в асимптотической структуре (18) появляется логарифм  $\ln \rho$ , требует отдельного рассмотрения. Однако при вычислении энергии  $\varepsilon_J(q)$  в этом нет необходимости, поскольку можно использовать соображения непрерывности (см. ниже рис. 1).

Обсудим этот случай, специфический для двумерной задачи. Дираковская система (6) с потенциалом  $V_R(\rho)$  (23) при  $\rho \leq R$  для  $J = 0$  приводит к самосопряженной форме уравнения для функции  $G(\rho)$  (см., например, [28]):

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} \left( \frac{1}{qf(\xi)} \frac{d}{d\xi} G \right) + qf(\xi)G &= 0, \\ F = \frac{1}{qf(\xi)} \frac{d}{d\xi} G, \quad \xi = \frac{\rho}{R}, \quad 0 \leq \xi \leq 1. \end{aligned} \quad (28)$$

После перехода к новой переменной  $\tilde{f}$ ,

$$\tilde{f} = q \int_0^\xi f(\xi') d\xi', \quad (29)$$

$$\tilde{f}(1) = qf_0, \quad f_0 = \int_0^1 f(\xi) d\xi,$$

соотношения (28) сводятся к осцилляторным,

$$\frac{d^2}{d\tilde{f}^2} G + G(\tilde{f}) = 0, \quad F(\tilde{f}) = \frac{d}{d\tilde{f}} G(\tilde{f}), \quad (30)$$

решение которых зависит от двух констант,

$$\psi_0(\tilde{f}) = \begin{pmatrix} A \sin \tilde{f} + B \cos \tilde{f} \\ B \sin \tilde{f} - A \cos \tilde{f} \end{pmatrix}. \quad (31)$$

Требование самосопряженности системы (6), т. е. исчезновения правой части равенства (13), дает

$$\frac{A}{B} = \operatorname{tg} \tilde{\theta}_0, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \tilde{\theta}_0 \leq \frac{\pi}{2}. \quad (32)$$

Из сравнения со структурой (20) получаем

$$\begin{aligned} \exp[2i\theta_\tau(J = 0; R)] &= \\ &= \exp \left[ 2iq \ln \left( \frac{1}{R_0} \right) - 2i\tilde{\theta}_0 \right], \quad (33) \end{aligned}$$

$$R_0 = R \exp(-f_0).$$

Можно показать (см. Приложение В), что фигурирующая здесь дополнительная неопределенная фаза  $\theta_0$  равна нулю. Это равенство следует из того, что при выключении взаимодействия уровни с  $J = 0$  исчезают из спектра, т. е.  $\varepsilon_J(q) \rightarrow 0$  при  $q \rightarrow 0$ .

Таким образом, если полный момент  $J = 0$ , то аналитическое решение системы (14) возможно при любой форме модификации (23) кулоновского потенциала на малых расстояниях. В качестве примера рассмотрим полиномиальную обрезавшую функцию в трехмерной задаче,

$$f(\xi_z, n) = \frac{n+1}{n} - \frac{1}{n} \xi_z^n, \quad \xi_z = \frac{\sqrt{\rho^2 + z^2}}{R}, \quad (34)$$

которая при  $z = 0$  переходит в функцию  $f(\rho, n)$ , введенную в (23), и отвечает плотности заряда примеси

$$\rho_n(\xi_z) = \frac{Ze}{4\pi} (n+1) \frac{\xi_z^{n-2}}{R^3} \theta(1 - \xi_z). \quad (35)$$

Тогда, согласно (29), для величины  $f_0$ , входящей в (33), получаем

$$\begin{aligned} f_0(n) &= \frac{n+2}{n+1}, \\ f_0(\infty) &= 1, \quad f_0(2) = \frac{4}{3}, \\ f_0(1) &= \frac{3}{2}, \quad f_0(0) = 2. \end{aligned} \quad (36)$$

Значение  $n = \infty$  отвечает однородному распределению заряда примеси по сфере радиуса  $R$  (прямоугольное обрезание), а  $n = 2$  — по шару того же радиуса:

$$\rho_\infty(\xi_z) = \frac{Ze}{4\pi R^3} \delta(1 - \xi_z), \quad \rho_2(\xi_z) = \frac{3Ze}{4\pi} \theta(1 - \xi_z).$$

Итак, для левой части равенства (27) при  $J = 0$  имеем

$$\begin{aligned} \exp[2i\theta_\tau(J = 0; R)] &= \exp\left(2iq \ln \frac{1}{R} + 2iqf_0\right), \\ R_0 &= R \exp(-f_0), \end{aligned} \quad (37)$$

причем  $R_0$  — эффективный радиус обрезания, зависящий от формы обрезавшей функции.

### 5. ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР

Полагая

$$r = 2\lambda\rho, \quad \lambda = \sqrt{1 - \varepsilon^2} > 0 \quad (38)$$

и следуя подходу Гордона [29] (см. также монографии [30, 31]), получаем убывающее на бесконечности решение системы (14):

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} &= C\sqrt{1 \pm \varepsilon} e^{-r/2} r^\sigma \left\{ \Psi(a, c; r) \pm \right. \\ &\quad \left. \pm \left(\frac{q}{\lambda} - J\right) \Psi(a + 1, c; r) \right\}. \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь  $C$  — нормировочный множитель,  $\sigma = \sqrt{J^2 - q^2}$ ,  $\Psi(a, c; r)$  — функция Трикоми [27],  $a = \sigma - \varepsilon q/\lambda$  и  $c = 1 + 2\sigma$  — ее параметры, а верхние (нижние) знаки относятся к функции  $F$  ( $G$ ).

На малых расстояниях при  $\sigma \neq 0$  решение (39) имеет структуру (15), причем

$$\begin{aligned} u_{\pm\sigma} &= \frac{\Gamma(\mp 2\sigma)(2\lambda)^{\pm\sigma}}{\Gamma\left(1 \mp \sigma - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)} \times \\ &\quad \times [q\sqrt{1 - \varepsilon} - (J \pm \sigma)\sqrt{1 + \varepsilon}], \end{aligned} \quad (40)$$

где  $\Gamma(z)$  — гамма-функция Эйлера.

1. При  $\sigma \geq 1/2$  из условия  $u_{-\sigma} = 0$  следует двумерный аналог формулы Зоммерфельда<sup>5)</sup>

$$\begin{aligned} \varepsilon_{n_\rho} &= \left\{ 1 + \frac{q^2}{(\sqrt{J^2 - q^2} + n_\rho)^2} \right\}^{-1/2}, \\ q &\leq \sqrt{J^2 - 1/4}, \\ n_\rho &= \begin{cases} 0, 1, 2, \dots, & J > 0, \\ 1, 2, 3, \dots, & J < 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (41)$$

для  $J = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ , см. также работу [32].

В области  $0 < \sigma < 1/2$ , согласно равенству (16), приходим к уравнению для спектра при  $\sqrt{J^2 - 1/4} < q < |J|$ :

$$\begin{aligned} &\frac{(2\lambda)^\sigma [q\sqrt{1 - \varepsilon} - (J + \sigma)\sqrt{1 + \varepsilon}]}{(2\lambda)^{-\sigma} [q\sqrt{1 - \varepsilon} - (J - \sigma)\sqrt{1 + \varepsilon}]} \times \\ &\quad \times \frac{\Gamma\left(1 + \sigma - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right) \Gamma(-2\sigma)}{\Gamma\left(1 - \sigma - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right) \Gamma(2\sigma)} = \text{tg}(\theta_\sigma), \\ &-\frac{\pi}{2} \leq \theta_\sigma \leq \frac{\pi}{2}, \quad \sigma = \sqrt{J^2 - q^2} > 0. \end{aligned} \quad (42)$$

Это равенство с учетом выражения (26) для  $\text{tg} \theta_\sigma(J; R)$  определяет энергии связанных состояний в модели прямоугольного обрезания кулоновского потенциала на малых расстояниях. Заметим, что при  $J^2 > q^2$  можно перейти к пределу  $R \rightarrow 0$  и возвратиться к формуле (41), которая следует также из равенства (42) при выборе значений параметра  $\theta_\sigma = \pm\pi/2$ .

2. В особом случае  $q^2 = q_s^2 = J^2$  имеем

$$\begin{aligned} u_0 &= \tilde{u}_0 \left[ \psi\left(1 - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right) + 2C \right], \\ \tilde{u}_0 &= \frac{J\sqrt{1 + \varepsilon} - q\sqrt{1 - \varepsilon}}{\Gamma\left(1 - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)}, \end{aligned} \quad (43)$$

где  $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$  — логарифмическая производная гамма-функции, а  $C = 0.577$  — постоянная Эйлера. Отсюда с учетом (19) следует уравнение для энергетического спектра:

$$\begin{aligned} \psi\left(1 - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right) + 2C &= \text{tg} \theta_0, \quad -\frac{\pi}{2} \leq \theta_0 \leq \frac{\pi}{2}, \\ \sigma &= \sqrt{J^2 - q^2} = 0. \end{aligned} \quad (44)$$

<sup>5)</sup> Для водородоподобного атома  $J = -\kappa$ ,  $\kappa = \pm 1, \pm 2, \dots$ . Ограничение  $\sigma \geq 1/2$  для основного состояния,  $\kappa = -1$ , означает, что заряд ядра  $Z < \sqrt{3}/2\alpha \approx 118.5$  [22].

Если здесь положить  $\theta_0 = \pm\pi/2$  и учесть, что функция  $\psi(z)$  имеет простые полюсы в точках  $z = -n_\rho$ ,  $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ , то опять приходим к формуле (26), в которой, однако,

$$\varepsilon_n = \left\{ 1 + \frac{q^2}{n^2} \right\}^{-1/2}, \quad (45)$$

$$n = n_\rho + 1 = 1, 2, \dots, \quad q = |J|,$$

и которую нельзя продолжить<sup>6)</sup> на бóльшие значения заряда  $q > |J|$ .

**3.** При дальнейшем увеличении заряда,  $q^2 > J^2$ , справедливо выражение (40), если в нем положить  $\sigma = i\tau$ . Тогда в соответствии с граничным условием (21) получим уравнение для спектра:

$$\frac{(2\lambda)^{i\tau} [q\sqrt{1-\varepsilon} - (J+i\tau)\sqrt{1+\varepsilon}] \Gamma\left(1+i\tau - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)}{(2\lambda)^{-i\tau} [q\sqrt{1-\varepsilon} - (J-i\tau)\sqrt{1+\varepsilon}] \Gamma\left(1-i\tau - \frac{\varepsilon}{\lambda}q\right)} \times$$

$$\times \frac{\Gamma(-2i\tau)}{\Gamma(2i\tau)} = \exp(2i\theta_\tau), \quad \text{Im } \theta_\tau = 0,$$

$$\tau = \sqrt{q^2 - J^2}.$$

Отсюда, в частности, следует уравнение для критического заряда примеси

$$q_{cr}^{(n)}(J) = Z_{cr}^{(n)}(J)\alpha_F,$$

при котором  $n$ -й уровень с квантовым числом  $J$  достигает границы нижнего континуума,  $\varepsilon = -1$ ,

$$\arg \Gamma\left(2i\sqrt{\left(q_{cr}^{(n)}(J)\right)^2 - J^2}\right) =$$

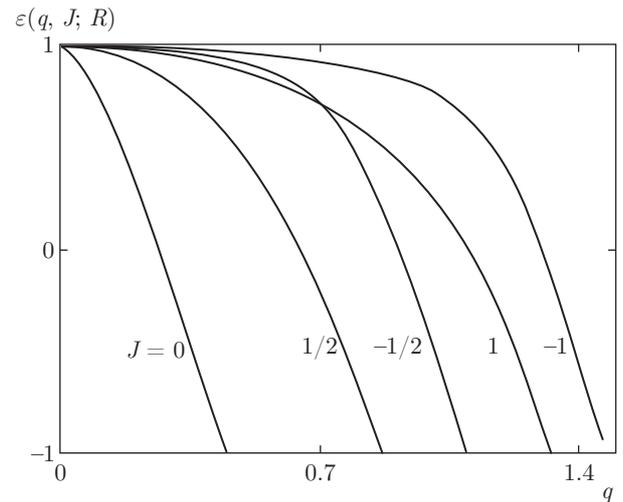
$$= \sqrt{\left(q_{cr}^{(n)}(J)\right)^2 - J^2} \times$$

$$\times \ln\left(2q_{cr}^{(n)}(J)\right) - \theta_\tau(J) + \pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (47)$$

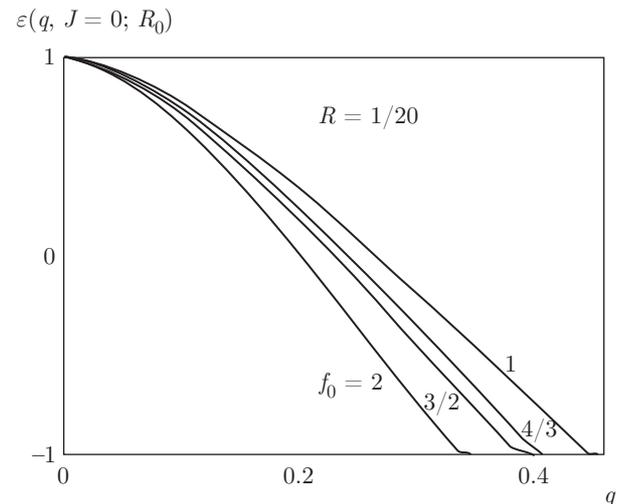
Равенство (46) совместно с (27) определяет дискретный спектр при  $q > |J| > 0$  в двумерной кулоновской задаче с прямоугольным обрезанием. Если же  $J = 0$ , то для фазы  $\theta_\tau(J = 0; R)$  нужно использовать выражение (37), определенное при любой форме обрезавшей функции на малых расстояниях, т. е. в модели (23) кулоновской задачи с короткодействием.

Зависимости энергии низшего уровня,  $\varepsilon(q, J; R)$ , от заряда примеси  $q = Z\alpha_F$  при радиусе обрезания  $R = 1/20$  для нескольких значений углового момента  $J$  показаны на рис. 1. При этом радиус  $Rl_F = 13.5 \text{ \AA}$  почти на порядок больше расстояния  $a_{CC} = 1.42 \text{ \AA}$  между атомами углерода, что

<sup>6)</sup> Для основного состояния водородоподобного атома это предельное значение заряда  $Z_s = \alpha^{-1} \approx 137$ .



**Рис. 1.** Зависимости энергии  $\varepsilon(q, J; R)$  низшего уровня с заданным значением орбитального момента  $M = J - 1/2$  от заряда  $q = Z\alpha_F$  при радиусе прямоугольного обрезания кулоновского потенциала  $R = 1/20$ . У кривых указаны значения квантового числа  $J$



**Рис. 2.** Зависимости энергии основного уровня  $\varepsilon(q, J = 0; R_0)$  от заряда  $q = Z\alpha_F$  при радиусе обрезания кулоновского потенциала  $R = 1/20$  при различных формах обрезавшей функции. У кривых указаны значения  $f_0$ , а значения эффективного радиуса обрезания приведены в табл. 2

необходимо для возможности описания электронных свойств графена на подложке SiC в рамках эффективного двумерного уравнения Дирака. Ход основного уровня энергии  $\varepsilon(q, J = 0; R)$  в зависимости от заряда  $q$  при различных радиусах  $R$  прямоугольного обрезания проиллюстрирован на рис. 2 в работе [13]. Зависимости энергии этого же уровня от

**Таблица 1.** Значения критического заряда  $q_{cr}^{(n)}(J) = Z_{cr}^{(n)}(J)\alpha_F$ , при которых низший ( $n = 0$ ) и первый возбужденный ( $n = 1$ ) уровни с данным значением орбитального момента  $M = J - 1/2$  достигают границы нижнего континуума при радиусе обрезания  $R = 1/20$

	$R = 1/20$			
	$J = 1/2$	$J = -1/2$	$J = 1$	$J = -1$
$q_{cr}^{(0)}(J)$	0.90	1.14	1.36	1.51
$q_{cr}^{(1)}(J)$	1.61	1.91	1.97	2.19

эффективного радиуса обрезания  $R_0 = R \exp(-f_0)$  при  $R = 1/20$  для нескольких значений  $f_0$ , т. е. для разных форм обрезания (см. выражения (23), (29), (36)), показаны на рис. 2.

Зависимость энергии уровней от заряда  $q$  и радиуса обрезания  $R$  вблизи границы верхнего континуума решений уравнения Дирака для различных значений момента  $J$  приведена в Приложении В.

Значения  $q_{cr}^{(n)}(J) = Z_{cr}^{(n)}(J)\alpha_F$  критического заряда, при которых нижний ( $n = 0$ ) и первый возбужденный уровень ( $n = 1$ ) с данным значением полного момента  $J = 0, 1/2, -1/2, 1, -1$  достигают границы нижнего континуума при радиусе обрезания  $R = 1/20$  указаны в табл. 1. Значения критического заряда основного  $q_{cr}^{(0)}(0)$  и первого возбужденного  $q_{cr}^{(1)}(0)$  уровней с  $J = 0$  при различных формах обрезания функции для  $R = 1/20$  приведены в табл. 2.

### 6. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ И КВАЗИДИСКРЕТНЫЕ УРОВНИ НИЖНЕГО КОНТИНУУМА

Параметры  $\theta_\sigma(J)$  и  $\theta_\tau(J)$  полностью определяют волновые функции и энергетический спектр задачи (14) при любых значениях заряда  $q = Z\alpha_F$ . Так, например, в случае сверхкритического заряда для нормированной на  $\delta(k - k')$  волновой функции задачи рассеяния в нижнем континууме получаем

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \exp\left(\mp i \frac{\pi}{4}\right) \sqrt{-\varepsilon \mp 1} \times \frac{\exp\left[\frac{\pi}{2}\left(\tau - \frac{\varepsilon}{k}q\right)\right]}{2\sqrt{\pi(-\varepsilon)}} \{\chi_\mp(\rho) \pm \chi_\mp^*(\rho)\}, \quad (48)$$

где

$$\begin{aligned} \chi_\mp(\rho) = & \exp[ik\rho + i\delta_J(k)](2k\rho)^{i\tau} \times \\ & \times \left[ \Psi\left(i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q, 1 + 2i\tau; -2ik\rho\right) \mp \right. \\ & \left. \mp \left(J - i\frac{q}{k}\right) \Psi\left(1 + i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q, 1 + 2i\tau; -2ik\rho\right) \right]. \end{aligned}$$

Здесь верхние (нижние) знаки относятся к функциям  $F$  ( $G$ ),  $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$ ,  $\varepsilon < -1$ ,  $\tau = \sqrt{q^2 - J^2}$ ,  $q > q_{cr}$ , а  $\delta_J(k)$  — парциальная фаза рассеяния, поскольку на больших расстояниях  $k\rho \gg 1$  имеем

$$\begin{pmatrix} F \\ G \end{pmatrix} = \frac{\exp\left(\mp i \frac{\pi}{4}\right)}{\sqrt{\pi(-\varepsilon)}} \sqrt{-\varepsilon \mp 1} \times \begin{cases} \cos\left[k\rho + \frac{\varepsilon}{k}q \ln(2k\rho) + \delta_J(k)\right], \\ i \sin\left[k\rho + \frac{\varepsilon}{k}q \ln(2k\rho) + \delta_J(k)\right]. \end{cases} \quad (49)$$

Парциальная матрица рассеяния  $S_J = \exp(2i\delta_J)$  определяется из условия (21), причем

$$\begin{aligned} u_\tau = & (2k)^{i\tau} \Gamma(-2i\tau) \left[ \exp\left(i\delta_J + \frac{\pi}{2}\tau\right) a - \right. \\ & \left. - \exp\left(-i\delta_J - \frac{\pi}{2}\tau\right) b \right], \quad u_{-\tau} = -u_\tau^*, \quad (50) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} a = & \frac{q\sqrt{-\varepsilon + 1} + (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon - 1}}{\Gamma\left(1 - i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}, \\ b = & \frac{q\sqrt{-\varepsilon + 1} - (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon - 1}}{\Gamma\left(1 - i\tau + i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}. \end{aligned} \quad (51)$$

Таким образом, окончательно получаем

$$\begin{aligned} \exp[2i\delta_J(k)] = & \frac{\alpha^* - \beta}{\beta^* - \alpha}, \quad \alpha = \exp\left(\frac{\pi}{2}\tau - i\eta_\tau\right) a, \\ \beta = & \exp\left(-\frac{\pi}{2}\tau - i\eta_\tau\right) b, \end{aligned} \quad (52)$$

где  $a$  и  $b$  определены выше и введено обозначение

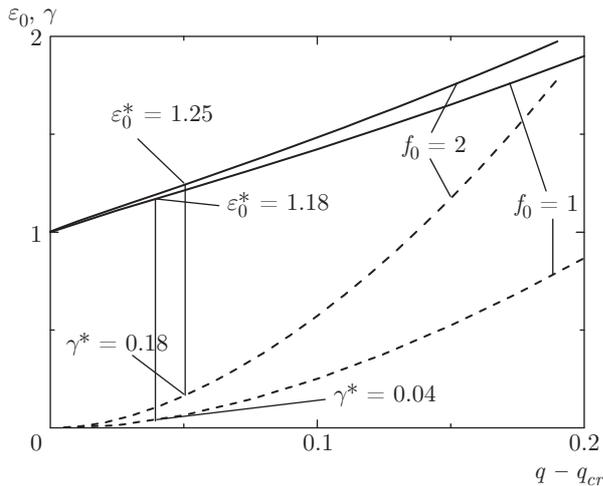
$$\exp[2i\eta_\tau(J)] = \frac{(2k)^{-i\tau} \Gamma(2i\tau)}{(2k)^{i\tau} \Gamma(-2i\tau)} \exp[2i\theta_\tau(J)]. \quad (53)$$

Гамовские волновые функции квазистационарных состояний получаются из функций (48), если в них опустить второе слагаемое в фигурных скобках, т. е. положить  $\exp[-i\delta_J(k)] = 0$ . Это условие отвечает полюсам матрицы рассеяния и приводит к следующему уравнению для спектра комплексных энергий:

$$\begin{aligned} & \frac{q\sqrt{-\varepsilon + 1} + (iJ - \tau)\sqrt{-\varepsilon - 1}}{q\sqrt{-\varepsilon + 1} + (iJ + \tau)\sqrt{-\varepsilon - 1}} \times \\ & \times \frac{\Gamma\left(1 + i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)}{\Gamma\left(1 - i\tau - i\frac{\varepsilon}{k}q\right)} = \exp(-\pi\tau) \exp[2i\eta_\tau(J; R)], \end{aligned} \quad (54)$$

**Таблица 2.** Значения критического заряда для основного  $q_{cr}^{(0)}$  и первого  $q_{cr}^{(1)}$  возбужденного уровней с орбитальным моментом  $M = -1/2$  при различных формах обрезавшей функции и соответствующих им эффективных радиусах обрезания  $R_0 = R \exp(-f_0)$  при  $R = 1/20$

	$R = 1/20, J = 0$			
	$f_0 = 1, R_0 = 0.018$	$f_0 = 4/3, R_0 = 0.013$	$f_0 = 3/2, R_0 = 0.011$	$f_0 = 2, R_0 = 0.007$
$q_{cr}^{(0)}(0)$	0.46	0.41	0.40	0.35
$q_{cr}^{(1)}(0)$	1.33	1.23	1.18	1.06



**Рис. 3.** Зависимости энергии квазидискретных уровней  $\varepsilon_0(q, J = 0; R_0)$  (сплошные кривые) и ширины уровня  $\gamma(q, J = 0; R_0)$  (штриховые кривые) от надкритичности, т. е. от разности  $q - q_{cr}$ , при  $R = 1/20$  для двух форм обрезания кулоновского потенциала. У кривых указаны значения  $f_0$  ( $f_0 = 1$  — равномерное распределение заряда по сфере радиуса  $R$ ,  $f_0 = 2$  — по шару того же радиуса), а также положения  $\varepsilon_0^*$  и ширины  $\gamma^*$  резонансов, отвечающие полюсам матрицы рассеяния (см. ниже рис. 7)

решения которого определяют как положение  $\varepsilon_0$  квазидискретных уровней, так и их ширины  $\gamma$ :

$$\varepsilon = -\varepsilon_0 + \frac{i}{2}\gamma, \quad \varepsilon_0 > 1, \quad \gamma > 0. \quad (55)$$

На рис. 3 проиллюстрированы зависимости  $\varepsilon_0$  и  $\gamma$  от формы обрезавшей функции для  $J = 0$ . На рис. 4а показаны зависимости положения квазидискретного уровня  $\varepsilon_0$  и его ширины  $\gamma$  от разности  $q - q_{cr}$ , т. е. от того, на сколько заряд примеси превышает свое критическое значение, для значений полного момента  $J = 1/2$  и  $J = -1/2$  при радиусе прямоугольного обрезания кулоновского потенциала  $R = 1/20$ . На рис. 4б приведена аналогичная картина для  $J = 1$  и  $J = -1$ . Из рис. 4 видно, что вблизи границы нижнего континуума,  $q \rightarrow q_{cr}$ , ширина

квазистационарного состояния мала,  $\gamma \ll \varepsilon_0 \sim 1$ . Это объясняется тем, что система (6) с потенциалом (23) при  $\varepsilon_0 \sim 1$  эквивалентна задаче с малопроницаемым барьером. Поясним это в квазиклассическом приближении для квазистационарных состояний вблизи границы нижнего континуума решений уравнения Дирака (см. работы [33, 34]). В этом случае для квазиклассического импульса радиального движения  $p(\rho) = \sqrt{2(E_{eff} - U_{eff})}$  получаем

$$E_{eff} = \frac{1}{2}(\varepsilon^2 - 1), \quad (56)$$

$$U_{eff}(\rho; \varepsilon; J) = -\frac{1}{2}V^2(\rho) + \varepsilon V(\rho) + \frac{J^2}{2\rho^2}$$

(см. рис. 5). Из-за кулоновского барьера в эффективном потенциале при  $\rho \gg R$  ширина уровня мала,  $\gamma \ll \varepsilon_0$ , так что

$$k = k'_0 - ik''_0, \quad k'_0 = \sqrt{\varepsilon_0^2 - 1} > 0, \quad (57)$$

$$k''_0 = \frac{\gamma}{2k'_0} > 0.$$

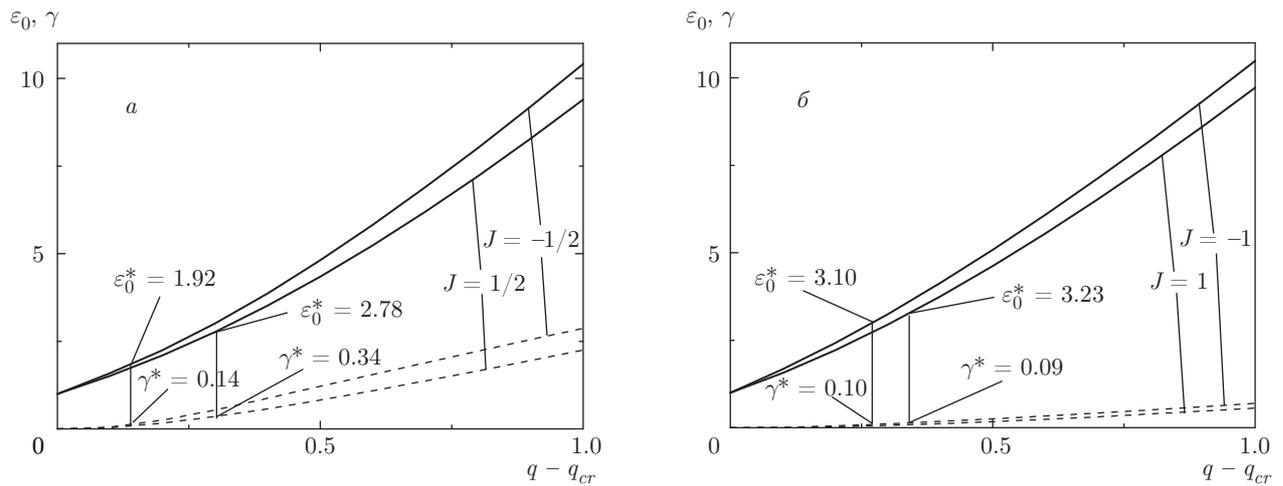
Поэтому на больших расстояниях с экспоненциальной точностью имеем

$$\Psi_{\varepsilon, J}(\rho) \sim \exp(ik\rho) = \exp(ik'_0\rho + k''_0\rho), \quad (58)$$

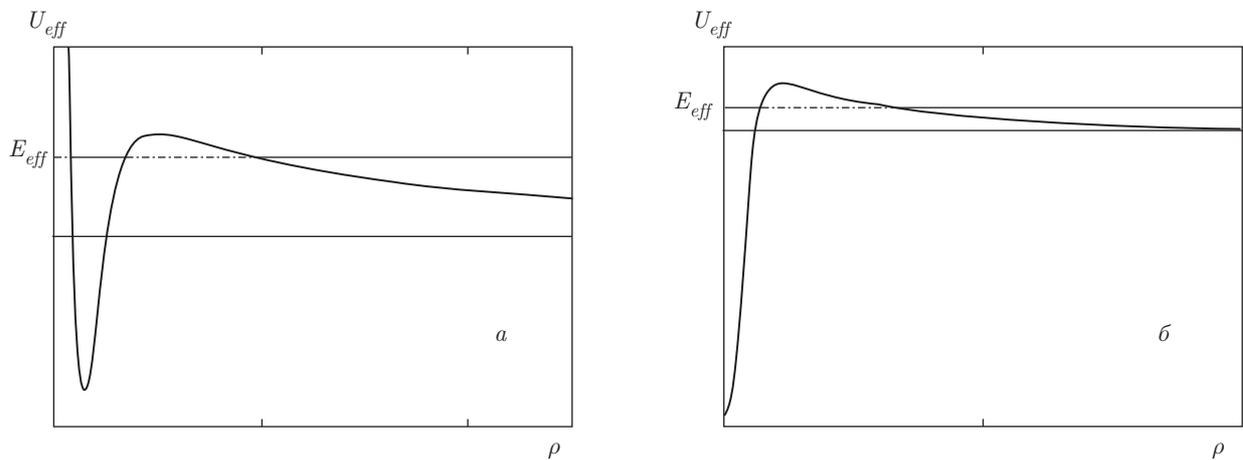
$$\rho \gg \frac{1}{|k|},$$

т. е. расходящуюся на бесконечности гамовскую волновую функцию. Противоположный знак  $\gamma$  означал бы наличие квадратично интегрируемого решения системы (6), т. е. связанного состояния с комплексной энергией, что не совместимо с самосопряженностью оператора  $H_{\theta_\tau}$ . Необычный знак перед шириной квазистационарного состояния  $\gamma$  в выражении (55) обеспечивает уход дискретного уровня при  $q > q_{cr}$  на нефизический лист и тем самым непротиворечивость одночастичного приближения [35] в рассматриваемой задаче.

Движение полюсов парциальной матрицы рассеяния  $S_J(k; q)$  в плоскости комплексного переменного



**Рис. 4.** Зависимости энергии квазидискретных уровней  $\varepsilon_0(q, J; R)$  (сплошные кривые) и ширины уровня  $\gamma(q, J; R)$  (штриховые кривые) от разности  $q - q_{cr}$  при  $R = 1/20$ . У кривых указаны значения полного момента  $J$ , а также положения  $\varepsilon_0^*$  и ширины  $\gamma^*$  резонансов, см. рис. 8. *а)* Для  $J = 1/2$  при  $q - q_{cr} = 0.3$  и  $J = -1/2$  при  $q - q_{cr} = 0.16$ ; *б)* для  $J = 1$  при  $q - q_{cr} = 0.34$  и  $J = -1$  при  $q - q_{cr} = 0.29$



**Рис. 5.** Эффективный потенциал (56) для состояний с  $\varepsilon < -1$ : *а* — с полным моментом  $J \neq 0$ ; *б* — с полным моментом  $J = 0$

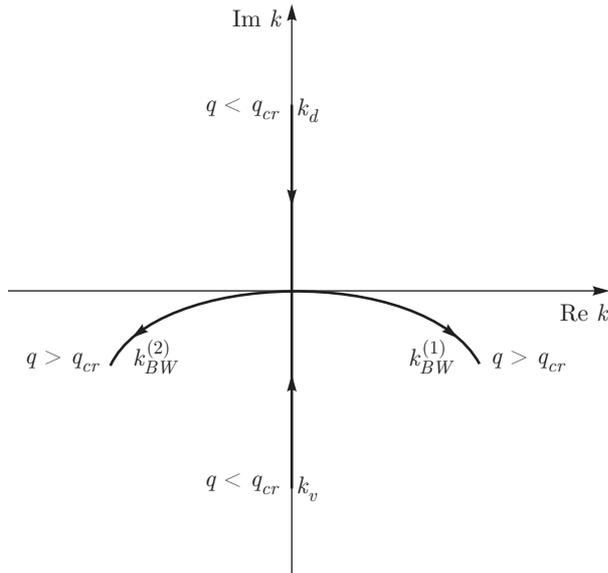
$k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$  вблизи границы нижнего континуума при увеличении заряда  $q$  показано на рис. 6. При  $q < q_{cr}(J)$  для энергии дискретного уровня имеем  $-1 < \varepsilon_d < 1$ , так что  $k_d = i\kappa_d$ ,  $\kappa_d > 0$ , и отвечающий ему полюс  $S$ -матрицы находится на мнимой оси верхней  $k$ -полуплоскости, т. е. на первом, физическом, листе.

При увеличении заряда полюс  $S$ -матрицы приближается к границе нижнего континуума,  $\varepsilon = -1$ , причем навстречу ему также по мнимой оси движется виртуальный уровень  $k_v$ , находящийся в нижней  $k$ -полуплоскости, т. е. на втором, нефизическом, листе. При  $q = q_{cr}(J)$  они сталкиваются, превращаясь в пару расходящихся при  $q > q_{cr}(J)$  брейт-вигнеров-

ских полюсов  $k_{BW}^{(1,2)}$ , находящихся на нефизическом листе. В этой закритической области ближайший к положительной вещественной полуоси полюс  $k_{BW}^{(1)}$  с комплексной энергией (55) отвечает квазистационарному состоянию дырки.

Действительно, согласно Фейнману, следует считать, что электроны с отрицательной энергией движутся вспять по времени, так что временная гамовская волновая функция

$$\Psi(t) \sim \exp(-i\varepsilon t) \equiv \exp[-i(-\varepsilon)(-t)] = \exp\left[-i\varepsilon_0(-t) - \frac{1}{2}\gamma(-t)\right]$$



**Рис. 6.** Движение полюсов  $S$ -матрицы в комплексной плоскости  $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1}$  вблизи границы нижнего континуума  $\varepsilon = -1$ . Стрелками указано направление движения при увеличении заряда  $q = Ze^2/\hbar v_F$

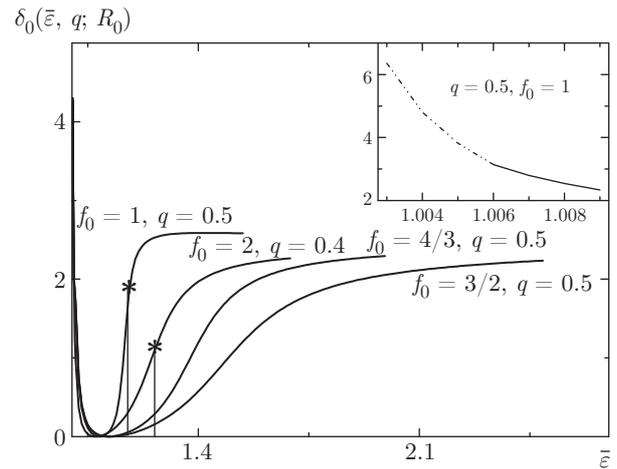
затухает с увеличением  $(-t)$ . Такие электроны отвечают дыркам в море Дирака с положительной энергией, что восстанавливает стандартную интерпретацию квазистационарных состояний в нижнем континууме.

К этому утверждению можно подойти и с другой стороны. С учетом модификации (23) кулоновского потенциала гамильтониан  $H_D(\rho, J; R)$  системы (6) является самосопряженным оператором и его собственные функции образуют полную систему. Поскольку электронный спектр энергий,  $-1 < \varepsilon < \infty$ , не перекрывается<sup>7)</sup> с дырочным,  $1 \leq \bar{\varepsilon} < \infty$ ,  $\bar{\varepsilon} = -\varepsilon$  при  $\varepsilon \leq -1$ , законным является вторичное квантование по Фарри [36] на базе этого полного набора функций. При этом для комплексной энергии квазистационарных состояний дырок имеем

$$\varepsilon_p = \varepsilon_0 - \frac{i}{2}\gamma, \quad \varepsilon_0 > 0, \quad \gamma > 0, \quad (59)$$

т. е. стандартное выражение для энергии квазидискретного уровня. Такие квазистационарные состояния могут проявиться как резонансы в рассеянии дырок на кулоновской примеси.

<sup>7)</sup> При  $Z = Z_{cr}$  состояние электрона с энергией  $\varepsilon_d = -1$  является дискретным, а состояния с  $\varepsilon < -1$  относятся к непрерывному спектру. Поэтому и в этом случае электронный спектр не перекрывается с дырочным, для которого  $\bar{\varepsilon} = -\varepsilon > 1$ .



**Рис. 7.** Фазы рассеяния  $\delta_0(\bar{\varepsilon}, q; R_0)$  для состояний с полным моментом  $J = 0$  как функции энергии дырки для нескольких форм обрезающей функции при  $R = 1/20$ . У кривых указаны значения заряда  $q = Z\alpha_F$  и  $f_0$ . Звездочками отмечены положения резонансов в рассеянии дырок на примеси (см. рис. 3). На вставке штрихпунктиром показана асимптотика (61)

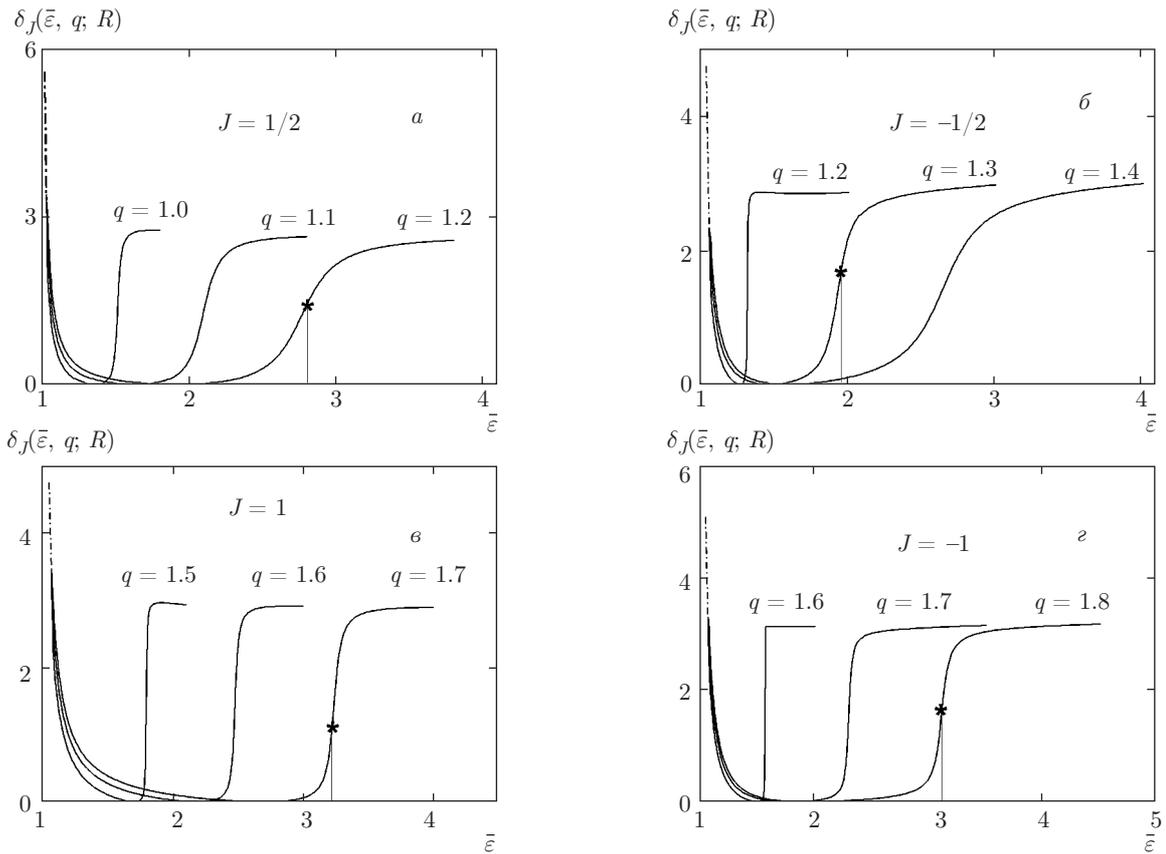
### 7. РЕЗОНАНСНОЕ РАССЕЯНИЕ ДЫРОК НА ПРИМЕСИ

Поскольку основной уровень первым опускается до границы нижнего континуума, обсуждение состояний рассеяния дырок с энергией  $\bar{\varepsilon} = -\varepsilon > 1$  начнем с состояний с полным моментом  $J = 0$ . Результаты вычисления фазы рассеяния  $\delta_0(\bar{\varepsilon}, q; R_0)$ , см. равенства (52)–(54) и граничное условие (37), для различных форм обрезающей функции представлены на рис. 7.

Фазы рассеяния  $\delta_J(\bar{\varepsilon}, q; R)$  с  $J = \pm 1/2$  и  $J = \pm 1$  для нескольких значений заряда примеси  $q = Z\alpha_F$  показаны на рис. 8. Конкретные значения  $q$  выбраны так, чтобы целые значения заряда  $Z$  примеси были максимально близки к критическим значениям  $Z_{cr}$ , указанным в табл. 2 для графена на подложке SiC, когда  $\alpha_F = 0.4$  и считается, для определенности, что эффективная диэлектрическая проницаемость  $\epsilon = 1$ .

Так же как и в нерелятивистской теории рассеяния (см. гл. 13 в монографии [37]), квазистационарные состояния в нижнем континууме могут проявляться как резонансы в рассеянии дырок. Соответствующие положения  $\varepsilon_0^*$  этих резонансов и их ширины  $\gamma^*$  приведены выше на рис. 3 и 4.

Если энергия дырки  $\bar{\varepsilon} > 1$  попадает в область резкого изменения фазы рассеяния, то возникает резонанс в ее рассеянии, а парциальное сечение отве-



**Рис. 8.** Фазы рассеяния  $\delta_J(\bar{\varepsilon}, q; R)$  как функции энергии дырки для значений полного момента  $J = 1/2$  (а),  $J = -1/2$  (б),  $J = 1$  (в),  $J = -1$  (г). Звездочки отмечают резонансы в рассеянии дырок на примеси, положения и ширины которых указаны на рис. 4. Штрихпунктир отвечает асимптотике (61)

чает формуле Брейта – Вигнера

$$\sigma_J(\bar{\varepsilon}) = \sin^2 \delta_J = \frac{(\gamma^*/2)^2}{(\bar{\varepsilon} - \varepsilon^*)^2 + (\gamma^*/2)^2}. \quad (60)$$

При этом с увеличением разности  $q - q_{cr}$  изменение фазы становится более плавным (см. рис. 7 и 8).

Для асимптотики фаз рассеяния при малых значениях волновых векторов  $k = \sqrt{\varepsilon^2 - 1} \ll 1$  имеем

$$\delta_J(k; q) \simeq \frac{q}{k} \left( \ln \frac{q}{k} - 1 \right) + \frac{\pi}{4} + \frac{1}{2} k q \ln k + O(k), \quad (61) \\ k \ll 1,$$

что используется для контроля численного счета. Поскольку такие значения  $k$  отвечают большим расстояниям,  $\rho \gg 1$ , в этом случае фазы рассеяния одинаковы при всех значениях полного момента  $J$ , так как центробежный потенциал «вымирает». Кроме того, на таких расстояниях доминирует «кулоновский хвост» потенциала  $V(\rho)$  и фазы рассеяния не зависят от регуляризации (23). Асимптотика (61) показана на рис. 7 и 8.

### 8. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

1. Рассмотрена двумерная радиальная кулоновская задача со щелью в электронном спектре с эффективным зарядом примеси  $Z > Z_{cr}$ . В этом случае с учетом модификации (23) кулоновского потенциала на малых расстояниях радиальный дираковский гамильтониан  $H_D(\rho; J; R)$  становится самосопряженным. Полный момент  $J = M + 1/2$ , где орбитальный момент  $M$  в двумерном случае может быть не только целым, но, в отличие от [26], и полуцелым. В специфическом для двумерной задачи случае  $J = 0$  учет регуляризации кулоновского потенциала проводится в аналитическом виде при любой форме обрезающей функции. Самосопряженность гамильтониана означает непротиворечивость одночастичного приближения для уравнения Дирака при любых значениях заряда, в том числе и в за критической области  $Z > Z_{cr}$ . Существование одночастичной волновой функции системы необходимо, чтобы локальную плотность состояний в графене

можно было непосредственно извлекать из эксперимента (см., например, обзор [38]).

2. С увеличением заряда любой дискретный уровень с энергией  $E = \epsilon t_* v_F^2$ , с полным моментом  $J = 0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$  и с радиальным квантовым числом  $n$  углубляется и при значении  $Z = Z_{cr}(J, n; R)$  достигает границы нижнего континуума решений уравнения Дирака с энергией  $\epsilon = -1$ , после чего исчезает из спектра.

3. В основном состоянии системы свободны все электронные состояния зоны проводимости (верхний континуум), а электронные состояния валентной зоны полностью заполнены (море Дирака). Незаполненные состояния в нижнем континууме стандартным образом интерпретируются как дырки с положительной энергией  $\bar{\epsilon} = -\epsilon$  и волновым вектором  $k = \sqrt{\epsilon^2 - 1} > 0$ .

При рассеянии дырок на примеси фазы рассеяния  $\delta_J(k; q; R)$  вещественны, а парциальная матрица рассеяния  $S_J = \exp(2i\delta_J)$  унитарна и при  $Z > Z_{cr}$ .

4. Поскольку амплитуды падающей и расходящейся волн с полным моментом  $J$  одинаковы (см. асимптотику (49), отвечающую стоячим волнам), неупругие каналы, в том числе спонтанное рождение пар, отсутствуют. Этим закрывается радиальная кулоновская задача существенно отличается от ситуации в случае «парадокса Клейна» [39]. Поясним это на примере состояний с  $J = 0$ .

Наряду с радиальной системой (1) при  $J = 0$  с регуляризованным потенциалом  $V_R(\rho)$ , определенным в (23), рассмотрим одномерное (вдоль оси  $z$ ) уравнение Дирака

$$\begin{pmatrix} 1+V(\xi) & \frac{d}{d\xi} \\ -\frac{d}{d\xi} & -1+V(\xi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F(\xi) \\ G(\xi) \end{pmatrix} = \epsilon \begin{pmatrix} F(\xi) \\ G(\xi) \end{pmatrix}, \quad (62)$$

$$z = l_F \xi, \quad -\infty < \xi < \infty.$$

Отсюда в квазиклассическом приближении для энергии электрона из верхнего (нижнего) континуума получаем

$$\epsilon = \pm \sqrt{P^2(\xi) + 1} + V(\xi).$$

Соответственно, для границы  $P(\xi) = 0$  верхнего континуума имеем

$$\epsilon_+ = 1 + V(\xi),$$

а для нижнего —

$$\epsilon_- = -1 + V(\xi)$$

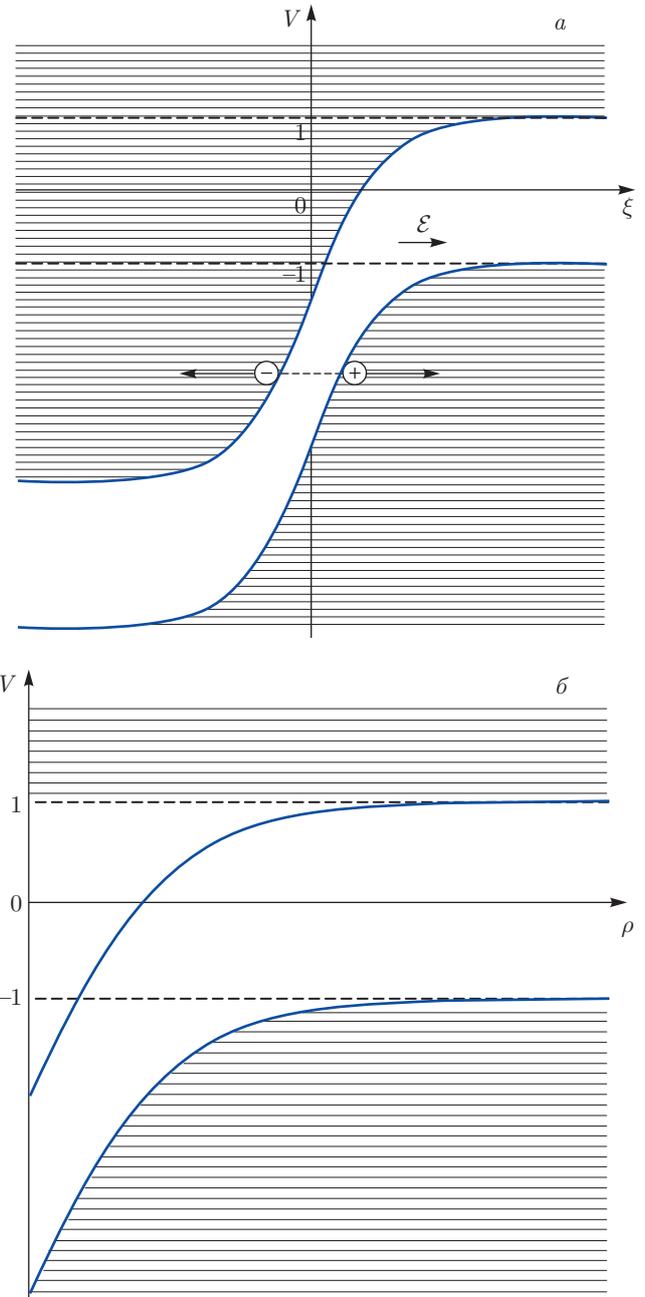


Рис. 9. а) Схема электронных энергий. Рождение пар из вакуума сильным электростатическим полем в результате туннелирования электронов из нижнего в верхний континуум, б) спонтанное рождение пар в сильном кулоновском поле отсутствует, поскольку нижний континуум энергий не перекрывается с верхним, хотя глубина ямы превышает ширину щели. Штриховкой показан непрерывный спектр

(см. рис. 9а в случае потенциала  $V(\xi) = \mathcal{E} \operatorname{th} \xi$ , где  $\mathcal{E} > 1$  — приведенное электрическое поле).

Процесс рождения электрон-дырочной пары можно интерпретировать как туннелирование

электрона из моря Дирака в верхний континуум. При этом движение электрона с  $\varepsilon < -1$  нужно рассматривать как движение «вспять во времени», т. е. как движение дырки (рис. 9а). Такое туннелирование возможно, если энергетические спектры этих континуумов перекрываются. В то же время в радиальной задаче, как это уже обсуждалось выше, электронный спектр энергий не перекрывается с дырочным (рис. 9б).

Качественно такое различие связано с тем, что в одномерном случае виртуально рожденную пару электрон–дырка электрическое поле разрывает, в то время как в радиальном случае и электрон, и дырка на малых расстояниях притягиваются к примеси (см. эффективный квазиклассический потенциал (56)). Поэтому спонтанное рождение электрон–дырочных пар в релятивистской кулоновской задаче отсутствует, что является дополнительным аргументом в пользу законности одночастичного приближения для уравнения Дирака при  $Z > Z_{cr}$ .

5. Может вызывать опасение [25] то, что, несмотря на самосопряженность гамильтониана  $H_D(\rho; J; R)$ , его спектр неограничен снизу. Однако при вторичном фермионном квантовании по Фарри на основе полного набора собственных функций самосопряженного кулоновского гамильтониана это возражение снимается — оно эквивалентно наличию моря Дирака в одночастичном подходе. Так, например, энергия основного состояния, которое отвечает полному отсутствию квазичастиц (как электронов, так и дырок), равна нулю. При этом состояние in-вакуума,  $|0, in\rangle$ , и состояние out-вакуума,  $|0, out\rangle$ , унитарно эквивалентны. Это заключение не зависит от того, реализуются или нет в рассматриваемой двумерной задаче полужелые орбитальные моменты.

6. Таким образом, экранировка сверхкритического заряда примеси за счет спонтанного рождения электрон–дырочных пар по сценарию, указанному в работах [8, 11], невозможна [12, 13]. Чтобы подтвердить это, необходимо определить электронную структуру графена вблизи примеси с зарядом  $Z > Z_{cr}$  методом сканирующей туннельной микроскопии и спектроскопии (см., например, работы [38, 40, 41]) или измерить энергию нескольких кулоновских уровней с помощью, например, фотоэлектронной спектроскопии с высоким угловым разрешением [2, 42, 43].

Кроме того, на основе таких экспериментальных данных можно сделать заключение о том, реализуются ли в рассматриваемой двумерной системе целые или полужелтые орбитальные моменты (см. При-

ложение С) либо одновременно и те, и другие, как в задаче рассеяния на крае экрана (см. гл. 11 в монографии [44]).

7. Необходимо отметить работу [41]. В ней показано, что одночастичное приближение для эффективного двумерного уравнения Дирака, описывающего электронные свойства бесщелевого графена в присутствии сверхзаряженной примеси,  $Z > Z_s = |J|\alpha_F$ , согласуется с экспериментальными данными по спектрам вольт-амперных характеристик, полученных методом сканирующей туннельной микроскопии. В частности, на измеренных вблизи от центра кластера из пяти димеров кальция вольт-амперных характеристиках четко прослеживается пик, отвечающий рассеянию дырки с  $J = 1/2$  на сверхкритической примеси (см. рис. 1 в работе [41]).

Естественная регуляризация кулоновского потенциала в этом случае полностью определяется свойствами примесей, которые были реализованы в виде кластеров из димеров кальция с размерами в интервале 20–60 Å. При этом изменение радиуса, использованного в этой работе для подгонки экспериментальных данных прямоугольного обрезания в пределах  $5 \text{ Å} < r_0 < 15 \text{ Å}$ , заметно не сказывалось на окончательном результате. Заметим, что в нашей работе в качестве параметра обрезания было выбрано для определенности значение  $R = 1/20$ , что отвечает радиусу  $r_0 = Rl_F = 13.5 \text{ Å}$ .

8. Действуя так же, как при получении уравнения (28), можно показать, что в бесщелевом случае фаза рассеяния для состояний с угловым моментом  $J = 0$  является плавной функцией энергии дырки  $\bar{\varepsilon} = -k$ . Так, например, для прямоугольного обрезания имеем

$$\delta_0(k, R) = Z\alpha_F[\ln(2kR) - 1],$$

что не приводит к пику на вольт-амперных характеристиках.

В то же время в допированном графене при небольших значениях надкритичности такая фаза является резонансной (см. рис. 7). Поэтому измерение спектров  $dI/dV$  вблизи дираковской точки может дать ответ на вопрос, реализуется ли в графене со щелью в электронном спектре значение  $M = -1/2$ , т. е. полужелтое квантование орбитального момента.

Детальное обсуждение возможности осуществления указанных выше экспериментов, а также влияния резонансного рассеяния дырок на примеси с зарядом  $Z > Z_{cr}$  на транспорт в допированном графене выходит за рамки данной статьи.

Авторы благодарны Д. Н. Воскресенскому, М. И. Высоцкому, В. Ф. Елесину, Б. М. Карнакову, Б. Н. Нарожному за стимулирующие дискуссии, а С. И. Годунову, кроме того, за указание на работу [41], и, в особенности, Николаю Борисовичу Нарожному, ушедшему от нас в самый разгар работы. Работа выполнена при государственной поддержке Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ (Соглашение с Министерством образования и науки РФ от 27 августа 2013 г. № 02.а03.21.0005). Также работа поддержана РФФИ (грант № 16-02-00963а).

**ПРИЛОЖЕНИЕ А**

**О граничном условии на бесконечности**

В рассматриваемой задаче, согласно неравенству (10) и первому из условий (11), следует, что функции  $F(\rho)$  и  $G(\rho)$  квадратично интегрируемы:

$$\int_a^\infty |F(\rho)|^2 d\rho \leq \infty, \tag{63}$$

$$\int_a^\infty |G(\rho)|^2 d\rho \leq \infty, \quad a > 0.$$

Однако это не обеспечивает стремления к нулю этих функций при  $\rho \rightarrow \infty$ . Примером могут служить квадратично интегрируемые функции

$$f_1(\rho) = \exp(-\rho^4 \sin^2 \rho),$$

$$f_2(\rho) = \rho^2 \exp(-\rho^8 \sin^2 \rho),$$

причем вторая из них даже не ограничена.

Если же, кроме того, квадратично интегрируемыми являются и их производные,

$$\int_a^\infty \left| \frac{dF}{d\rho} \right|^2 d\rho < \infty, \quad \int_0^\infty \left| \frac{dG}{d\rho} \right|^2 d\rho < \infty, \tag{64}$$

то выполняются равенства (12)

$$F(\infty) = G(\infty) = 0. \tag{65}$$

Доказательство см., например, в разд. 5.6 монографии [22].

В случае потенциалов, исчезающих на бесконечности, для оператора Дирака (6) при  $\rho \rightarrow \infty$  имеем

$$H_D^{(\infty)} = \begin{pmatrix} 1 & \frac{d}{d\rho} \\ -\frac{d}{d\rho} & -1 \end{pmatrix}.$$

Тогда для больших значений  $a$  и  $b$  получаем

$$\int_a^b (H_D \Psi)^\dagger (H_D \Psi) d\rho = \int_a^b (H_D^{(\infty)} \Psi)^\dagger (H_D^{(\infty)} \Psi) d\rho =$$

$$= \int_a^b \left( \left| \frac{dF}{d\rho} \right|^2 + \left| \frac{dG}{d\rho} \right|^2 + |F|^2 + |G|^2 \right) d\rho +$$

$$+ (F^* G + G^* F) \Big|_a^b. \tag{66}$$

Если величины  $a$  и  $b$  независимо стремятся к бесконечности, то в силу непрерывности функций  $F(\rho)$  и  $G(\rho)$  на любом конечном интервале внеинтегральное слагаемое в правой части выражения (66) исчезает. В то же время и левая часть этого равенства обращается в нуль в силу второго из условий (11). С учетом неравенств (63) то же самое справедливо и для интегралов от  $|F|^2$  и  $|G|^2$ . Поэтому и остающийся интеграл от  $|dF/d\rho|^2$  и  $|dG/d\rho|^2$  также обращается в нуль.

Это означает, что при произвольном фиксированном нижнем пределе интеграл

$$\int_a^\infty \left( \left| \frac{dF}{d\rho} \right|^2 + \left| \frac{dG}{d\rho} \right|^2 \right) d\rho < \infty, \tag{67}$$

а с ним сходятся и интегралы (64), что и приводит к граничным условиям (65).

Наоборот, граничные условия

$$F(\infty) = G(\infty) = 0, \quad \frac{dF}{d\rho}(\infty) = \frac{dG}{d\rho}(\infty) = 0$$

обеспечивают сходимость на больших расстояниях интегралов

$$\int_a^\infty \Psi^\dagger \Psi d\rho < \infty, \quad \int_a^\infty (H_D \Psi)^\dagger (H_D \Psi) d\rho < \infty,$$

так что вопрос, является ли гамильтониан  $H$ , определенный в (11), самосопряженным или нет, сводится к поведению волновых функций в пределе  $\rho \rightarrow 0$ .

Пользуясь случаем, заметим, что доказательство граничных условий на бесконечности,  $F(\infty) = G(\infty) = 0$ , приведенное в работе [12], неправомерно. Использованное там равенство для  $(H_D \Psi, H_D \Psi)$  без дополнительных соображений некорректно, ср. с (66).

Заметим, что Кейз при обсуждении релятивистской кулоновской задачи в работе [23] предполагает, что волновые функции экспоненциально убывают на бесконечности.

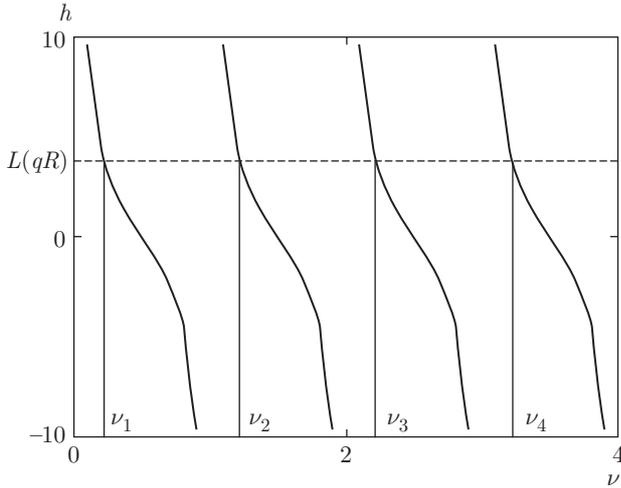


Рис. 10. Графическое решение уравнения (70)

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Мелкие кулоновские уровни

Для состояния с  $J = 0$ , считая, что заряд примеси  $Z\alpha_F = q \ll 1$ , положим

$$\lambda = \frac{q}{\nu}, \quad \varepsilon_\nu(J = 0, q) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{\nu^2} + \dots, \quad (68)$$

где  $\nu$  — аналог главного числа в нерелятивистской кулоновской задаче. Подставляя эти выражения в левую часть равенства (46) с  $\tau = q$ , разлагая ее по  $q \ll 1$  и учитывая значение фазы  $\theta_\tau(J = 0, R)$  (33), приходим к соотношению

$$2iq \left[ \ln \left( \frac{2q}{\nu} \right) + \psi(1 - \nu) + \frac{1}{2\nu} + 2C \right] = 2iq \ln \left( \frac{1}{R_0} \right) - 2i\tilde{\theta}_0. \quad (69)$$

Здесь  $\psi(z)$  — логарифмическая производная гамма-функции, а  $C = 0.557$  — постоянная Эйлера.

При выключении взаимодействия,  $q \rightarrow 0$ , т. е. когда исчезают дискретные уровни, из равенства (69) следует, что дополнительная неопределенная фаза в граничном условии (32) должна обращаться в нуль,  $\tilde{\theta}_0 = 0$ . Тогда уравнение (его решение приведено на рис. 10)

$$h(\nu) = L(qR), \quad q \ll 1, \quad R \ll 1, \quad (70)$$

где

$$h(\nu) = \frac{1}{2\nu} + \psi(1 - \nu) - \ln \nu, \\ L(qR) = \ln \left( \frac{1}{qR} \right) + f_0 - 2C - \ln 2,$$

определяет энергетический спектр состояний с  $J = 0$  вблизи границы верхнего континуума решений двумерного радиального уравнения Дирака с модифицированным кулоновским потенциалом (23), причем константа  $f_0 = \int_0^1 f(\xi) d\xi$  полностью определяется формой обрезающей функции.

Для основного состояния «большой логарифм»  $\Lambda = \ln(1/qR) \gg 1$  в правой части уравнения (70) компенсируется полюсом при  $\nu \rightarrow 0$  в левой, так что

$$\nu = \frac{1}{2\Lambda} \left( 1 + \frac{\ln \Lambda}{\Lambda} + \dots \right), \quad (71) \\ \varepsilon_0(0, q) = 1 - 2q^2 \Lambda^2 + 4q^2 \Lambda \ln \Lambda.$$

Учитывая, что функция  $\psi(z)$  имеет простые полюсы при  $z = -n_\rho$ ,  $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ , для возбужденных состояний с  $J = 0$  в главном логарифмическом приближении получаем

$$\nu = n + \frac{1}{\Lambda}, \quad \varepsilon_n(0, q) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{n^2} + \frac{q^2}{n^3 \Lambda}, \quad (72)$$

что полезно сравнить с выражением (45).

Для состояний с полным моментом  $J \neq 0$  с учетом соотношений (42) и (26) для энергий  $\varepsilon_n(J, q)$  вблизи верхнего континуума получаем

$$\varepsilon_n \left( \frac{1}{2}, q; R \right) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{(n - 1/2)^2} + R \frac{q^4}{(n - 1/2)^4} + \dots, \\ \varepsilon_n(1, q; R) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{n^2} + \frac{4}{3} R^2 \frac{q^4}{n^4} + \dots, \\ \varepsilon_n \left( -\frac{1}{2}, q; R \right) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{(n + 1/2)^2} + R \frac{n(n + 2)q^5}{(n + 1)(n + 1/2)^5} + \dots, \\ \varepsilon_n(-1, q; R) = 1 - \frac{1}{2} \frac{q^2}{(n + 1)^2} + R^2 \frac{n(n + 2)q^6}{24(n + 1)^4} + \dots,$$

$n = 1, 2, \dots$  — натуральные числа.

В отличие от равенства (71) для основного уровня, здесь можно перейти к пределу  $R \rightarrow 0$ . В этом пределе результаты (73) согласуются с разложением двумерной формулы Зоммерфельда (41) при  $q \ll 1$ , причем порядок следования низших состояний с данным моментом  $J$  такой же, как и в (73), т. е. сверху вниз:

$$\varepsilon_1(1/2, q) < \varepsilon_1(1, q) < \varepsilon_1(-1/2, q) < \varepsilon_1(-1, q), \quad (74) \\ q \ll 1, \quad R = 0.$$

Нерегулярность следования уровней  $\varepsilon_1(-1/2, q; R)$  и  $\varepsilon_1(1, q; R)$  при небольших зарядах  $q$ , т.е. «пересечение термов»<sup>8)</sup>, отвечающих разной симметрии (см. рис. 1), объясняется разной зависимостью уровней с  $J = 1$  и  $J = -1/2$  от радиуса обрезания кулоновского потенциала на малых расстояниях  $R$ .

**ПРИЛОЖЕНИЕ С**

**О генераторе двумерных вращений**

Дифференциальный оператор инфинитезимальных вращений в плоскости  $(x, y) = (\rho, \varphi)$ ,

$$L_z = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi,$$

определяет оператор конечных вращений

$$\exp(i\alpha L_z)\chi(\varphi) = \chi(\varphi + \alpha) \quad (75)$$

на множестве  $C_0^\infty[0, 2\pi]$  всех бесконечно дифференцируемых финитных функций с носителем внутри интервала  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ .

Следуя Вайтману [45] (см. также п. 188 в книге [46]), рассмотрим ассоциированный с  $L_z$  оператор  $L$ ,

$$L\chi(\varphi) = -i\chi'(\varphi), \quad \mathcal{D}(L) = \{\chi \in C_0^\infty[0, 2\pi]\}, \quad (76)$$

который действует в гильбертовом пространстве  $\mathcal{H} = \mathcal{L}_2[0, 2\pi] \equiv \mathcal{L}_2$  всех квадратично интегрируемых функций  $\Psi(\varphi)$  с эрмитовым скалярным произведением

$$(\Phi, \Psi) = \int_0^{2\pi} \Phi^*(\varphi)\Psi(\varphi) d\varphi. \quad (77)$$

Тогда

$$(\chi_2, L\chi_1) - (L\chi_2, \chi_1) = \chi_2^*(\varphi)\chi_1(\varphi)|_0^{2\pi} = 0, \quad (78)$$

где первое равенство — стандартное следствие интегрирования по частям, а второе — принадлежности функций  $\chi_i, i = 1, 2$  к плотному в гильбертовом пространстве множеству  $C_0^\infty[0, 2\pi]$ . Таким образом, оператор  $L$  является симметричным, как говорят математики, или эрмитовым, как иногда говорят физики.

<sup>8)</sup> Такое пересечение низших уровней с  $J = 1$  и  $J = -1/2$  как функций заряда  $q$  при радиусе обрезания  $R = 1/20$  происходит при значении  $q = 0.696$ , когда  $\varepsilon_1(-1/2, q; R) = \varepsilon_1(1, q; R) = 0.708$ .

Однако он не является самосопряженным оператором. Действительно, по определению сопряженно-го оператора  $L^\dagger$  имеем

$$(L^\dagger\Psi, \chi) - (\Psi, L\chi) = -i\Psi^*(\varphi)\chi(\varphi)|_0^{2\pi} = 0, \quad (79)$$

где обращение в нуль внеинтегрального слагаемого достигается только за счет функции  $\chi(\varphi) \in C_0^\infty[0, 2\pi]$ . Поэтому сопряженный оператор равен

$$L^\dagger\Psi(\varphi) = -i\Psi'(\varphi), \quad (80)$$

$$\mathcal{D}(L^\dagger) = \{\Psi \in \mathcal{L}_2, \Psi' \in \mathcal{L}_2\},$$

причем производную  $\Psi'(\varphi)$  следует понимать в смысле теории распределений Шварца. Поскольку области определения операторов  $L^\dagger$  и  $L$  не совпадают,  $\mathcal{D}(L^\dagger) \neq \mathcal{D}(L)$ , то  $L^\dagger \neq L$  и оператор  $L$  не является наблюдаемой [47].

Чтобы получить самосопряженное расширение оператора  $L$ , заметим, что равенство (75) справедливо лишь для достаточно малых  $\alpha$ , причем малость определяется тем, насколько близок носитель  $\chi(\varphi)$  к границам интервала  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . При достаточно больших значениях угла вращения  $\alpha$  оператор сдвига (75) будет перемещать функцию  $\chi(\varphi)$  к границам этого интервала. Что произойдет в этом случае, нельзя сказать, зная оператор  $L$  только на его области определения  $\mathcal{D}(L)$ . Нужны дополнительные соображения.

Для сохранения нормы, т.е. интеграла

$$(\Psi, \Psi) = \int_0^{2\pi} |\Psi(\varphi)|^2 d\varphi, \quad (81)$$

нужно чтобы все, что сдвигается через одну из границ, возвращалось через другую. Так как под знаком интеграла (81) стоит  $|\Psi|$ , прошедшая через границу функция может изменить фазу. В силу квантовомеханического принципа суперпозиции эта фаза должна быть одинаковой для всех функций.

Итак, должно существовать однопараметрическое семейство самосопряженных операторов  $L_\theta^\dagger = L_\theta$ ,

$$L_\theta\Psi(\varphi) = -i\Psi'(\varphi), \quad (82)$$

$$\mathcal{D}(L_\theta) = \{\Psi \in \mathcal{L}_2, \Psi' \in \mathcal{L}_2, \Psi(2\pi) = e^{i\theta}\Psi(0)\},$$

где производную  $\Psi'(\varphi)$  опять-таки следует понимать в смысле теории распределений [22, 45, 46]. В самом деле,

$$(\Phi, L_\theta\Psi) - (L_\theta\Phi, \Psi) = -i\Phi^*(\varphi)\Psi(\varphi)|_0^{2\pi} = 0, \quad (83)$$

причем последнее равенство справедливо только в том случае, когда обе функции,  $\Phi$  и  $\Psi$ , принадлежат к области определения оператора  $L_\theta$ , т. е. подчиняются, в частности, граничному условию

$$\Psi(2\pi) = e^{i\theta}\Psi(0), \quad (84)$$

см. равенство (2) в тексте. Теперь вместо (75) возникает унитарный оператор конечных вращений

$$U(\alpha) = \exp(i\alpha L_\theta), \quad U(\alpha)\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi + \alpha), \quad (85)$$

определенный на всем гильбертовом пространстве. В физическом контексте генератор  $L_\theta$  называют наблюдаемой.

Нетрудно проверить, что индексы дефекта  $(n_+, n_-)$  [22] оператора  $L$  равны  $(1, 1)$ . Его эрмитово расширение будет отвечать индексам дефекта  $(0, 0)$ . Это означает [45], что операторы  $L_\theta$  образуют единственное однопараметрическое семейство самосопряженных расширений оператора  $L$  (детали см. в работе [21]).

В силу условия (84), для собственных значений оператора  $L_\theta$  имеем

$$L_\theta \Psi_M(\varphi) = M \Psi_M(\varphi), \quad M = \delta + m, \quad (86)$$

$$0 \leq \delta < 1, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

а его собственные функции

$$\Psi_M(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iM\varphi} \quad (87)$$

образуют ортонормированный базис в пространстве волновых функций  $\Psi(\varphi) \in \mathcal{L}_2$  и реализуют многозначные при  $\delta \neq 0$  неприводимые представления двумерной группы вращений  $SO(2)$  [19, 48].

Поскольку многозначные волновые функции не могут быть исключены заранее, возникает вопрос, почему в трехмерном случае реализуются только целые значения орбитального момента,  $l = 0, 1, 2, \dots$  [47]. По-видимому, впервые эта проблема была поставлена и решена Паули в работе [15], а во всех деталях рассмотрена в работе [16]. Основная причина целочисленного квантования орбитального момента в трехмерном случае состоит в требовании унитарной эквивалентности операторов проекций орбитального момента  $L_x, L_y, L_z$ . Оно исключает многозначные, в том числе двузначные неприводимые представления группы  $SO(3)$  в координатном представлении (см. также Приложение 1 в монографии [49]).

Однако этот запрет не относится к двузначным представлениям этой группы, обеспечивающим полуцелое квантование полного углового момента с

учетом спина. Поэтому если исходить из некоторой трехмерной физической задачи и от нее перейти к подгруппе вращений в двумерном пространстве, то могут возникать только однозначные (в случае орбитального момента) и двузначные (спиновые) представления.

При обращении времени, точнее при обращении направления движения [50], орбитальный момент меняет знак:

$$\Phi_{-M}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-iM\varphi} = \Psi_M^*(\varphi).$$

Поскольку, согласно Вигнеру, антиунитарный оператор обращения времени сохраняет норму, комплексно-сопряженные волновые функции  $\Psi_M^*(\varphi)$  также должны подчиняться граничному условию (84),

$$e^{i\theta} = \frac{\Phi_M^*(\varphi)}{\Phi_M^*(0)} = \left( \frac{\Phi_M(\varphi)}{\Phi_M(0)} \right)^* = e^{-i\theta},$$

$$\theta = 2\pi\delta, \quad 0 \leq \delta < 1.$$

Отсюда следует, что топологическая фаза Паули принимает значения  $\theta = 0$  или  $\theta = \pi$ , поэтому возможны только два значения для  $\delta$ ,  $\delta = 0$  и  $\delta = 1/2$  [19], отвечающие однозначному и двузначному представлениям двумерной группы вращений  $SO(2)$ . Таким образом, в графене, который представляет собой практически идеальную двумерную систему [1], может реализовываться только целое или полуцелое квантование орбитального момента.

Конкретное значение  $\delta$  в квантовомеханических двумерных системах фиксируется дополнительными физическими требованиями. Так, например, основному состоянию трехэлектронной циркулярной квантовой точки в силу принципа запрета Паули отвечает полный орбитальный момент  $M = 1/2$  [20, 21]. В рассматриваемой одноэлектронной задаче в графене этот аргумент не применим, так что заранее предсказать значение  $\delta$  не удастся и окончательное слово остается за экспериментом.

Вне зависимости от того, реализуются или нет в графене целые значения углового момента  $J$ , т. е. полуцелое квантование орбитального момента, полученные для них в данной работе результаты, в частности для парциальных фаз рассеяния, могут быть полезны в других физических задачах. Действительно, как уже упоминалось, система (14) при  $J = -\varkappa = \pm 1$ , где  $\varkappa$  — дираковское квантовое число, эквивалентна радиальному уравнению в релятивистской кулоновской задаче. В то же время при  $J = 0$  система (6) отвечает одномерному уравнению Дирака. Она появляется в ряде задач зонной теории твердого тела, см., например, работу Келдыша

[51] (теория глубоких примесных уровней в полупроводниках), а также работу [52], в которой рассматриваются локализованные примеси в оптических и экситонных изоляторах.

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Perez, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
2. S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nature Materials* **6**, 770 (2007).
3. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli et. al, *Nano Lett.* **10**, 3360 (2010).
4. T. P. Kaloni, R. P. Yoshi, N. D. Adhikari, and U. Schwingenschlögl, *Appl. Phys. Lett.* **104**, 073116 (2014).
5. А. И. Ахиезер, В. Б. Берестецкий, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1969).
6. A. Sommerfeld, *Ann. der Phys.* **51**, 1 (1916).
7. I. Pomeranchuk and Ya. Smorodinsky, *J. Phys. USSR* **9**, 97 (1945).
8. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. H. Castro Neto, *Phys. Rev. B* **78**, 085101 (2008).
9. С. С. Герштейн, Я. Б. Зельдович, *ЖЭТФ* **57**, 654 (1969).
10. В. С. Попов, *Письма в ЖЭТФ* **11**, 254 (1970); *ЯФ* **12**, 429 (1970).
11. Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, *УФН* **105**, 403 (1971).
12. В. М. Кулешов, В. Д. Мур, Н. Б. Нарожный, А. М. Федотов, Ю. Е. Лозовик, В. С. Попов, *УФН* **185**, 845 (2015).
13. В. М. Кулешов, В. Д. Мур, Н. Б. Нарожный, А. М. Федотов, Ю. Е. Лозовик, *Письма в ЖЭТФ* **101**, 282 (2015).
14. D. S. Novikov, *Phys. Rev. B* **76**, 245435 (2007).
15. W. Pauli, *Helv. Phys. Acta* **12**, 147 (1939).
16. C. van Winter, *Ann. Phys.* **47**, 232 (1968).
17. D. P. DiVincenzo and E. J. Mele, *Phys. Rev. B* **29**, 1685 (1984).
18. В. И. Арнольд, *Математические методы классической механики*, Наука, Москва (1979).
19. K. Kowalski, K. Podlaski, and J. Rembielinski, *Phys. Rev. A* **66**, 032118 (2002).
20. V. D. Mur, N. B. Narozhny, A. N. Petrosyan, and Yu. E. Lozovik, *Письма в ЖЭТФ* **88**, 786 (2008).
21. V. M. Kuleshov, V. D. Mur, N. B. Narozhny, and Yu. E. Lozovik, *Few-Body Systems* **57**, 1103 (2016).
22. Р. Рихтмайер, *Принципы современной математической физики*, Мир, Москва (1982).
23. К. М. Case, *Phys. Rev.* **80**, 797 (1950).
24. Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, *ТМФ* **150**, 41 (2007).
25. Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, Р. Феррейра, *ТМФ* **187**, 213 (2016).
26. В. Р. Халилов, Ки Ын Ли, *ТМФ* **169**, 368 (2011).
27. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. I, Наука, Москва (1973), т. II, Наука, Москва (1974).
28. Э. Л. Айнс, *Обыкновенные дифференциальные уравнения*, ОНТИ, Харьков (1939).
29. W. Gordon, *Z. Phys.* **48**, 11 (1928).
30. Г. Бете, *Квантовая механика простейших систем*, ОНТИ, Ленинград, Москва (1935).
31. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980).
32. V. R. Khalilov and C. L. Ho, *Mod. Phys. Lett. A* **13**, 615 (1998).
33. В. Д. Мур, В. С. Попов, Д. Н. Воскресенский, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 140 (1978).
34. В. Д. Мур, В. С. Попов, *ЯФ* **28**, 137 (1978).
35. В. Д. Мур, В. С. Попов, *ТМФ* **27**, 204 (1976).
36. W. H. Furry, *Phys. Rev.* **81**, 115 (1951).
37. Дж. Тейлор, *Теория рассеяния. Квантовая теория нерелятивистских столкновений*, Мир, Москва (1975).
38. M. Morgenstern, *Phys. Stat. Sol. (b)* **248**, 2423 (2011).
39. O. Klein, *Z. Phys.* **53**, 157 (1929).
40. Y. Wang, V. W. Brar, A. V. Shytov, Q. Wu, W. Regan, H.-Z. Tsai, A. Zettl, L. S. Levitov, and M. F. Crommie, *Nature Phys.* **8**, 653 (2012).

41. Y. Wang, D. Wong, A. V. Shytov et al., *Science* **340**, 737 (2013).
42. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller et al., *Science* **313**, 951 (2006).
43. T. Seyller, A. Bostwick, K. V. Emtsev et al., *Phys. Stat. Sol. (b)* **245**, 2437 (2008).
44. Ф. М. Морс, Г. Фешбах, *Методы теоретической физики*, т. 2, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
45. А. С. Вайтман, *Проблемы в релятивистской динамике квантовых полей*, Наука, Москва (1968).
46. В. И. Смирнов, *Курс высшей математики*, т. 5, Физматгиз, Москва (1959).
47. П. Дирак, *Принципы квантовой механики*, Наука, Москва (1979).
48. М. Хамермеш, *Теория групп и ее применение к физическим проблемам*, Мир, Москва (1966).
49. Дж. Блатт, В. Вайскопф, *Теоретическая ядерная физика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1954).
50. Е. Вигнер, *Теория групп*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961).
51. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **45**, 364 (1963).
52. А. С. Александров, В. Ф. Елесин, *ЖЭТФ* **72**, 1970 (1977).