

СПЕКТРЫ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В ГРАФЕНЕ В ОКРЕСТНОСТИ КУЛОНОВСКИХ ПРИМЕСЕЙ

А. И. Бреев^{a*}, Р. Феррейра^{b**}, Д. М. Гитман^{a,b,c***}, Б. Л. Воронов^{c****}

^a Томский государственный университет
634050, Томск, Россия

^b Институт физики университета Сан-Паулу
70297-400, Сан-Паулу, Бразилия

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

Поступила в редакцию 9 октября 2019 г.,
после переработки 20 ноября 2019 г.
Принята к публикации 21 ноября 2019 г.

Исследуется спектр электронных возбуждений при наличии точечных и регуляризованных кулоновских примесей в допированном графене. Для кулоновского поля точечного заряда используются модель Дирака и теория самосопряженных расширений симметрических операторов. Построено семейство самосопряженных гамильтонианов, описывающих возбуждения для любого заряда примеси. Найдены спектры и (обобщенные) собственные функции для всех таких гамильтонианов. Также рассматривается спектральная задача для регуляризованного кулоновского потенциала примеси для случая специальной регуляризации. Исследуются точные уравнения для зарядов примесей, которые могут генерировать связанные состояния с энергией, совпадающей с верхней границей отрицательной ветви непрерывного спектра (сверхкритические заряды), и вычисляются эти заряды.

DOI: 10.31857/S0044451020050107

1. ВВЕДЕНИЕ

Хорошо известно, что низкоэнергетические электронные возбуждения в монослое графена в присутствии внешнего электромагнитного поля могут быть описаны моделью Дирака на соответствующем фоне [1], а именно $2 + 1$ квантованным полем Дирака. На самом деле, в рамках последней модели правильнее говорить о квазичастицах, которые являются киральными дираковскими фермионами в $2 + 1$ измерениях. Учитывая, что дисперсионными поверхностями являются так называемые конусы Дирака, щель между верхней и нижней ветвями в соответствующих спектрах дираковских частиц очень мала, а носители заряда безмассовые, можно ожидать, что механизм вакуумной неустойчивости Швингера уже

существенен и в лабораторных условиях почти любое электрическое внешнее поле является сверхкритическим¹⁾, и эффект рождения частиц оказывается доминирующим (при определенных условиях) в различных квантовых процессах во внешнем электрическом поле в графене. Применение КЭД с сильным полем и неустойчивым вакуумом для описания квантовых процессов в графене требует непертурбативных методов. В частности, при помощи данных методов в работе [4] была изучена проводимость графена, особенно в так называемом нелинейном режиме. Рождение электронно-дырочных пар недавно наблюдалось в графене при исследовании поведения его вольт-амперных характеристик [5].

Известно, что одним из свойств графена является его большая чувствительность к примесям и де-

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

** E-mail: rafaelfpi@gmail.com

*** E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

**** E-mail: voronov@lpi.ru

¹⁾ Заметим также, что стандартный вакуум КЭД в $(3 + 1)$ становится нестабильным из-за кулоновского притяжения между электроном и позитроном выше критического значения постоянной тонкой структуры [2, 3], $\alpha_{cr} = \pi/8$, или при ее истинном значении $\alpha = 1/137$, если наложено внешнее магнитное поле выше 10^{42} Гс [3].

фактам, что связано с убыванием плотности состояний носителей тока. Транспорт электронов в присутствии заряженных примесей, таких как кулоновские центры, становится одной из наиболее важных задач, касающихся достижения максимальной подвижности носителей в графене [6]. Поскольку закон Кулона остается неизменным в недопированном графене и приблизительно сохраняется при малом и умеренном допировании, процессы рассеяния в основном контролируются неэкранированным кулоновским потенциалом, в отличие от обычных металлов, где экранирование является полным [7].

Потенциал, индуцированный подложкой, может нарушить симметрию решетки и создать щель в спектре электронов графена. Наличие щели говорит о том, что движение электронов необходимо описывать массивным уравнением Дирака $2 + 1$. Задача расчета электронных спектров в допированном графене в присутствии кулоновских примесей рассматривалась в работах [8–11].

В релятивистской теории рассеяния для $2 + 1$ электронов Дирака в графене на кулоновских примесях используются решения спектральной задачи для дираковского гамильтониана в $2 + 1$ измерениях с соответствующим точечным или регуляризованным трехмерным кулоновским потенциалом. Соответствующая спектральная задача в $3 + 1$ подробно обсуждалась в работах [12–15] для точечного кулоновского потенциала и в [15, 16] для регуляризованного кулоновского потенциала. Для точечного кулоновского потенциала непротиворечивая трактовка этой задачи существенно зависит от правильного определения дираковского гамильтониана как самосопряженного (в дальнейшем с. с.) оператора в соответствующем гильбертовом пространстве. Тогда как в $3 + 1$ измерениях особенности такого определения проявляются только для ядер с большими Z , $Z > 119$, которых нет в лабораторных условиях, для кулоновских примесей в графене этот порог значительно меньше из-за свойств дираковских квазичастиц в графене.

В этой статье мы рассматриваем задачу корректного определения дираковского гамильтониана для квазичастиц в допированном графене в присутствии кулоновской примеси с зарядом Z как с. с. оператора и его спектральный анализ. Мы представляем строгое рассмотрение всех аспектов этой задачи, основанное на теории с. с. расширений симметрических операторов [13]. Также мы исследуем спектральную задачу для случая регуляризованного кулоновского поля примеси, который позволяет получить ее точное аналитическое описание.

Статья организована следующим образом. Определения базовых понятий и соотношений, объясняющих постановку задачи, приведены в разд. 2. В разд. 3 описывается математически строгая процедура сведения проблемы построения с. с. вращательно-инвариантного дираковского гамильтониана в полном гильбертовом пространстве к задаче построения с. с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов с определенным угловым моментом. Дальнейшее исследование делится на две части. В первой части (разд. 4–6) рассматривается кулоновское поле точечных примесей в допированном графене. В разд. 4 строится общее решение радиальных уравнений, а также некоторые конкретные решения этих уравнений, используемые в дальнейшем. Раздел 5 посвящен построению с. с. парциальных радиальных гамильтонианов с произвольным допустимым значением углового момента j . При решении соответствующих спектральных задач в четырех различных областях верхней полуплоскости изменения параметров j , Z области различаются по характеру с. с. граничных условий в начале координат, которые задают парциальные радиальные гамильтонианы. Раздел 6 посвящен описанию особенностей полного гамильтониана в зависимости от заряда примеси Z . Вторая часть исследования (разд. 7–10) посвящена регуляризованному кулоновскому полю примесей в допированном графене. В случае специальной регуляризации кулоновского поля получены точные уравнения, которые позволяют найти точечный спектр (расположенный в полуинтервале $[-m, m)$) и соответствующие связанные состояния, см. разд. 7. В разд. 9 приведены точные уравнения для зарядов, которые дают связанные состояния с энергией $E = -m$, совпадающей с верхней границей отрицательной ветви непрерывного спектра. В разд. 10 обсуждается понятие сверхкритического заряда примеси. Раздел 11 посвящен обсуждению результатов, полученных в первой и второй частях статьи.

2. УРАВНЕНИЕ ДИРАКА В $2 + 1$ ИЗМЕРЕНИЯХ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА

Рассмотрим спектр возбуждений квазичастиц в присутствии одной кулоновской примеси с зарядом Ze , помещенной в середину шестиугольника решетки графена. При этом мы ограничиваемся окрестностями двух так называемых точек Дирака, которые являются областями спектра квазичастиц, наиболее

чувствительных к воздействию примеси. Кроме того, мы предполагаем, что примесь является ионом, полностью лишенным электронов, поэтому Z является его атомным номером.

Введем декартову систему координат с осями x и y , лежащими в плоскости графена, и осью z , перпендикулярной плоскости. Примесь находится в начале координат. Кулоновское поле ослабляется поляризацией кристалла на расстояниях, больших межатомных. Чтобы учесть этот эффект, в кулоновский потенциал необходимо ввести макроскопическую диэлектрическую проницаемость ϵ (которая также называется эффективной диэлектрической проницаемостью):

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

где $\mathbf{r} = (x, y)$ — двумерный вектор (лежащий в плоскости графена $z = 0$).

Квазичастицы в графене находятся в двумерном пространстве, тогда как кулоновское поле, созданное примесью, — в трехмерном пространстве, и поэтому кулоновский потенциал в плоскости графена $z = 0$ ведет себя как ρ^{-1} . Если бы мы рассматривали электрическое поле, создаваемое примесью заряда q , который находится в двумерном пространстве, то электрический потенциал Φ был бы равен $\Phi = q/(2\pi\epsilon) \ln(1/\rho)$, как следует из уравнения Пуассона $\Delta\Phi = -(q/\epsilon)\delta(\mathbf{r})$ в двумерном пространстве.

В случае, когда экранирование заряда происходит из-за электронов в графене, метод RPA дает значение $\epsilon \approx 5$ (см. [17]). Если мы полностью пренебрегаем эффектами поляризации в графене, но графен находится на подложке SiO_2 , то $\epsilon \approx 2.5$ (см. также [18]).

Отметим, что потенциалы, индуцированные подложкой, могут нарушать симметрию решетки и создавать щель в электронном спектре между зоной проводимости и валентной зоной. Выбирая подложку, можно регулировать эффективную массу носителей заряда и исследовать явления, отсутствующие в безмассовом случае. В этой статье мы предполагаем, что носители заряда в графене имеют некоторую эффективную массу $m_* > 0$.

Чтобы различить две разные точки Дирака в графене, введем параметр (или индекс) $s = \pm 1$, который будем называть изоспином из-за определенной аналогии с последним. Обозначим через \mathbf{K}_s точки Дирака, координаты которых в зоне Бриллюэна выбраны в виде $\mathbf{K}_s = (4\pi s/(3a), 0)$, где $a = 2.46 \text{ \AA}$ — постоянная решетки.

Как уже говорилось выше, мы ограничиваемся рассмотрением окрестностей двух точек Дирака, что означает, что рассматриваем низкоэнергетические квазичастичные возбуждения и электронные переходы между ближайшими атомами углерода. В этом приближении полное гильбертово пространство \mathfrak{H}_{tot} квантовых состояний квазичастицы в графене является прямой ортогональной суммой двух гильбертовых пространств \mathfrak{H}_s , $s = \pm 1$, каждое из которых связано с соответствующей точкой Дирака \mathbf{K}_s . Пространства \mathfrak{H}_s являются гильбертовыми пространствами двумерных дублетов, так что $\mathfrak{H}_{tot} = \mathfrak{H}_1 \oplus \mathfrak{H}_{-1}$, $\mathfrak{H}_1 = \mathfrak{H}_{-1} = \mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$.

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

В рамках приближения сильной связи и для малой энергии квазичастиц стационарное уравнение Шредингера для электрона сводится к следующим двум независимым уравнениям для огибающих блоховских функций в окрестности каждой точки Дирака \mathbf{K}_s [19]:

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

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

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

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

где $v_F \approx 10^6$ см/с — скорость Ферми, $\Delta_{dop} = 2m_* v_F^2$ — ширина щели, $\alpha_F = e^2/(\hbar v_F)$ — «постоянная тонкой структуры» в графене, $\{\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z\}$ — матрицы Паули.

В дальнейшем мы будем использовать следующие обозначения: $\check{H}_s = (\hbar v_F)^{-1} \check{\mathcal{H}}_s$, $E = (\hbar v_F)^{-1} \mathcal{E}$ и $m = (2\hbar v_F)^{-1} \Delta_{dop}$. Заметим, что переменная E и параметр m имеют размерность обратной длины. Уравнение (1) принимает вид

$$\check{H}_s \Psi_s(\mathbf{r}) = E \Psi_s(\mathbf{r}), \quad s = \pm 1, \quad (3)$$

где \check{H}_s — дифференциальные выражения в декартовой и полярной системах координат ρ, ϕ ($x = \rho \cos \phi$, $y = \rho \sin \phi$) соответственно:

$$\begin{aligned} \check{H}_s &= -i(s\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y) - \frac{g}{\rho} + m\sigma_z = \\ &= -i(s \cos \phi \sigma_x + \sin \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \rho} + \\ &+ \frac{i}{\rho}(s \sin \phi \sigma_x - \cos \phi \sigma_y) \frac{\partial}{\partial \phi} - \frac{g}{\rho} + m\sigma_z. \end{aligned} \quad (4)$$

Для того чтобы придать смысл квантовомеханической задаче на собственные значения (3) для гамильтонианов \hat{H}_s , мы должны решить две проблемы. Первая — определить или построить гамильтонианы \hat{H}_s как с. с. операторы с областями определения в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$ функций, действующих на свои области определения соответствующими дифференциальными выражениями \check{H}_s (4) (для краткости будем говорить, что операторы \hat{H}_s связаны с дифференциальными выражениями \check{H}_s). Вторая проблема — выполнить спектральный анализ полученных гамильтонианов, т. е. вычислить их спектры и соответствующие (в общем случае обобщенные) собственные функции. Решая обе проблемы, мы следуем пути, принятому в работе [12] в случае (3+1)-мерного уравнения Дирака в регуляризованных и нерегуляризованных кулоновских полях.

3. РЕДУКЦИЯ К РАДИАЛЬНОМУ УРАВНЕНИЮ

Начнем с определения начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$, ассоциированных с соответствующими дифференциальными выражениями \check{H}_s (4). Поскольку коэффициентные функции дифференциальных выражений \check{H}_s являются гладкими вне начала координат, мы выбираем пространство гладких дублетов с компактным носителем для областей определения $D(\hat{H}_s^{in})$ операторов \hat{H}_s^{in} .

Чтобы обойти проблемы с сингулярностью типа $1/\rho$ кулоновского потенциала, дополнительно потребуем обращения в нуль дублетов $D(\hat{H}_s^{in})$ в некоторой окрестности начала координат, разной для каждого дублета. Заметим, что области определения $D(\hat{H}_s^{in})$ (которые совпадают для обоих значений s) плотны в пространстве \mathfrak{H} . Таким образом, операторы \hat{H}_s^{in} определяются как

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

Очевидно, что оператор \hat{H}_s^{in} симметрический.

Мы строим с. с. гамильтонианы \hat{H}_s как с. с. расширения соответствующих исходных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} . Для того чтобы подчеркнуть это обстоятельство, введем дополнительный индекс ϵ для $\hat{H}_s, \hat{H}_s \rightarrow \hat{H}_s^\epsilon$. Существуют разные с. с. расширения данного оператора \hat{H}_s^{in} , так что в дальнейшем индекс ϵ будет заменен другим, более информативным.

Потребуем, чтобы операторы \hat{H}_s^ϵ были вращательно-инвариантными, так же как исходные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} . Смысл этого требования мы поясним ниже.

Существуют два разных унитарных представления U_s группы вращений $\text{Spin}(2)$ в \mathfrak{H} , которые связаны с соответствующими операторами \hat{H}_s^{in} . Генератор \hat{J}_s представления группы U_s , называемый оператором углового момента (их два), является с. с. оператором в \mathfrak{H} , определенным на абсолютно непрерывных и периодических по $\phi \in [0, 2\pi]$ дублетах и ассоциированным с дифференциальным выражением $\check{J}_s = -i\partial/\partial\phi + s\sigma_z/2$. Для каждого s гильбертово пространство \mathfrak{H} представляется в виде прямой ортогональной суммы

$$\mathfrak{H} = \sum_j^\oplus \mathfrak{H}_{sj}, \quad j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots, \quad (5)$$

подпространств \mathfrak{H}_{sj} , которые являются собственными пространствами оператора углового момента \hat{J}_s , соответствующими всем его собственным значениям $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$. Подпространство \mathfrak{H}_{sj} с данными s и j состоит из дублетов Ψ_{sj} вида

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\rho}} e^{ij\phi} \begin{pmatrix} e^{-is\phi/2} f(\rho) \\ -ise^{is\phi/2} g(\rho) \end{pmatrix} \in \mathfrak{H}_{sj}. \quad (6)$$

Данные дублеты являются собственными функциями оператора \hat{J}_s с собственным значением j , $\hat{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = \check{J}_s \Psi_{sj}(\mathbf{r}) = j \Psi_{sj}(\mathbf{r})$. Отметим, что спектры двух операторов \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 совпадают. Функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ называются радиальными функциями. На физическом языке разложения (5) и (6) соответствуют разложению дублетов $\Psi(\mathbf{r}) \in \mathfrak{H}$ по собственным функциям двух разных операторов углового момента \hat{J}_{-1} и \hat{J}_1 .

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

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

со скалярным произведением

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

так что $L^2(\mathbb{R}_+) = L^2(\mathbb{R}_+) \oplus L^2(\mathbb{R}_+)$. Тогда из (6) и соотношения

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

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

$$\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj}F(\rho), \quad F(\rho) = V_{sj}^{-1}\Psi_{sj}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

При необходимости легко записать явную форму операторов V_{sj} и V_{sj}^{-1} .

Начальные симметрические операторы \hat{H}_s^{in} являются вращательно-инвариантными. А именно, каждый оператор \hat{H}_s^{in} инвариантен относительно представления U_s группы вращений. По определению это означает, что каждое подпространство \mathfrak{H}_{sj} (собственное пространство генератора \hat{J}_s с собственным значением j) приводит оператор \hat{H}_s^{in} . Другими словами, оператор \hat{H}_s^{in} коммутирует с проекторами P_{sj} на подпространства \mathfrak{H}_{sj} , см. [20]. Это означает следующее. Пусть $\Psi_s(\mathbf{r}) = \sum_j \Psi_{sj}(\mathbf{r}) \in D(\hat{H}_s^{in})$. Тогда

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

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

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

и исследование вращательно-инвариантного оператора \hat{H}_s^{in} сводится к изучению операторов \hat{H}_{sj}^{in} . Заметим, что эти факты основаны на формальной коммутативности дифференциальных выражений \hat{H}_s и \hat{J}_s , $[\hat{H}_s, \hat{J}_s] = 0$.

Сделаем общее замечание относительно довольно популярного понимания квантовомеханической

симметрии в физической литературе на приведенном выше примере вращательной симметрии. В физической литературе утверждение о том, что операторы \hat{H}_s^{in} вращательно-инвариантны и, как следствие, их исследование сводится к изучению их частей \hat{H}_{sj}^{in} , действующих в \mathfrak{H}_{sj} , обычно отождествляется с утверждением, что операторы \hat{H}_s^{in} коммутируют с соответствующими генераторами \hat{J}_s группы вращений, а это, в свою очередь, часто отождествляется с коммутативностью дифференциальных выражений \hat{H}_s и \hat{J}_s , $[\hat{H}_s^{in}, \hat{J}_s] = [\hat{H}_s, \hat{J}_s] = 0$. Строго говоря, такое утверждение некорректно: формальная коммутативность дифференциальных выражений никоим образом не подразумевает коммутативность соответствующих операторов, тем более что коммутатор двух неограниченных операторов в гильбертовом пространстве, вообще говоря, не определен.

Каждый оператор \hat{H}_{sj}^{in} является симметрическим оператором, действующим в подпространстве \mathfrak{H}_{sj} . Очевидно, он индуцирует симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в гильбертовом пространстве $L^2(\mathbb{R}_+)$, который унитарно эквивалентен оператору \hat{H}_{sj}^{in} , $\hat{h}_{in}(Z, j, s) \stackrel{def}{=} V_{sj}^{-1}\hat{H}_{sj}^{in}V_{sj}$, так что $\hat{h}_{in}(Z, j, s)F = V_{sj}^{-1}\hat{H}_{sj}^{in}\Psi_{sj}$, $\Psi_{sj} = V_{sj}F$. Оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ определяется следующим образом:

$$\hat{h}_{in}(Z, j, s) = \begin{cases} D_{h_{in}(Z, j, s)} = C_0^\infty(\mathbb{R}_+), \\ \hat{h}_{in}(Z, j, s)F(\rho) = \check{h}(Z, j, s)F(\rho), \end{cases} \quad (8)$$

где $C_0^\infty(\mathbb{R}_+) = C_0^\infty(\mathbb{R}_+) \oplus C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$. Дифференциальное выражение $\check{h}(Z, j, s)$,

$$\check{h}(Z, j, s) = -i\sigma_y \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}\sigma_x - \frac{g}{\rho} + m\sigma_z, \quad \kappa = -sj, \quad g = \alpha_F \epsilon^{-1}Z, \quad (9)$$

будем называть парциальным радиальным дифференциальным выражением.

Построение с. с. вращательно-инвариантных гамильтонианов \hat{H}_s как с. с. расширений начальных симметрических операторов \hat{H}_s^{in} , $\hat{H}_s = \hat{H}_s^\epsilon$ сводится к построению с. с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}(Z, j, s)$ в $L^2(\mathbb{R}_+)$ как с. с. расширений начальных симметрических парциальных радиальных операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$, $\hat{h}(Z, j, s) = \hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$. Это происходит следующим образом. Пусть операторы $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ являются такими расширениями. Они, очевидно, индуцируют с. с. расширения $\hat{H}_{sj}^\epsilon = V_{sj}\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)V_{sj}^{-1}$ начальных симметрических опе-

раторов \hat{H}_{sj}^{in} в подпространствах \mathfrak{H}_{sj} . Тогда прямая ортогональная сумма парциальных операторов \hat{H}_{sj}^c ,

$$\hat{H}_s^c = \sum_j \oplus \hat{H}_{sj}^c, \quad (10)$$

представляет собой вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} , причем с. с. вращательно-инвариантный гамильтониан $\hat{H}_s = \hat{H}_s^c$ в \mathfrak{H} . И обратно, любое с. с. вращательно-инвариантное расширение начального симметрического оператора \hat{H}_s^{in} имеет структуру (10). Спектр гамильтониана \hat{H}_s^c дается объединением спектров парциальных радиальных гамильтонианов, $\text{sp} \hat{H}_s^c = \cup_j \text{sp} \hat{h}_c(Z, j, s)$, и соответствующие собственные функции, связанные с \mathfrak{H}_{sj} , получаются из собственных функций операторов $\hat{h}_c(Z, j, s)$ в $L^2(\mathbb{R}_+)$ при помощи преобразования V_{sj} , см. (7).

Как было сказано выше, мы действуем по аналогии с построением с. с. вращательно-инвариантного (относительно группы $\text{Spin}(3)$) дираковского гамильтониана для электрона в кулоновском поле в трех пространственных измерениях [12–14, 16]. Напомним, что в работах [12–14, 16] была решена проблема построения и спектрального анализа с. с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_c(Z, j, \zeta)$ в $L^2(\mathbb{R}_+)$ как с. с. расширений начальных симметричных парциальных радиальных операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, \zeta)$, определенных в пространстве $C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ и связанных с дифференциальными выражениями вида

$$\check{h}(Z, j, \zeta) = -i\sigma_y \frac{d}{dr} + \frac{\varkappa}{r} \sigma_x - \frac{q}{r} + m\sigma_z, \quad (11)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, $\varkappa = \zeta j$, $j = 1/2, 3/2, \dots$ — квантовое число, отвечающее трехмерному угловому моменту, $\zeta = \pm 1$ — спиновый индекс, $q = \alpha Z$, α — постоянная тонкой структуры, m — масса электрона. Дифференциальное выражение (11) отличается от дифференциального выражения $\check{h}(Z, j, s)$ в (9) только значениями коэффициентов и физическим смыслом параметров. Для сравнения наших результатов с данной трехмерной задачей удобно ввести параметр $\zeta = \zeta(j, s) = -s \text{sgn}(j) = \pm 1$, $\varkappa = \zeta(j, s) |j|$.

4. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Перейдем к общему решению системы двух линейных обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \check{h}(Z, j, s)F(\rho) &= WF(\rho), \\ F(\rho) &= \begin{pmatrix} f(\rho) \\ g(\rho) \end{pmatrix}, \quad W \in \mathbb{C}, \end{aligned} \quad (12)$$

которое необходимо при вычислении спектров и собственных функций парциальных радиальных гамильтонианов; систему (12) иногда называют (стационарным) парциальным радиальным уравнением Шредингера. Действительные значения W в дальнейшем будут обозначаться буквой E . Для наших целей достаточно рассмотреть значения W , принадлежащие верхней комплексной полуплоскости, $W = E + iy$, $y \geq 0$. Также нас интересует предел $W \rightarrow E + i0$.

Система (12) для функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ представляется в виде

$$\begin{aligned} \frac{df}{d\rho} + \frac{\varkappa}{\rho} f(\rho) - \left(W + m + \frac{g}{\rho}\right) g(\rho) &= 0, \\ \frac{dg}{d\rho} - \frac{\varkappa}{\rho} g(\rho) + \left(W - m + \frac{g}{\rho}\right) f(\rho) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Будем называть уравнения (13) радиальными уравнениями. Радиальные уравнения для трехмерной задачи те же.

Для полноты приведем общее решение радиальных уравнений, следуя стандартной процедуре [13, 21]. Начнем с замены переменных:

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

где

$$\begin{aligned} \Upsilon^2 &= \varkappa^2 - g^2, \quad W \pm m = r_\pm e^{i\phi_\pm}, \\ 0 &\leq \phi_\pm \leq \pi, \quad r_\pm \geq 0, \\ \Lambda &= \sqrt{\frac{W-m}{W+m}} = \sqrt{\frac{r_-}{r_+}} e^{-i(\phi_+ - \phi_-)/2}, \\ K &= \sqrt{W^2 - m^2} = \sqrt{r_+ r_-} e^{i(\phi_+ + \phi_-)/2}. \end{aligned}$$

В новых переменных система радиальных уравнений (13) имеет вид

$$\begin{aligned} z \frac{d^2 Q(z)}{dz^2} + (\beta - z) \frac{dQ(z)}{dz} - \alpha Q(z) &= 0, \\ P(z) &= -\frac{1}{b_+} \left(z \frac{d}{dz} + \alpha\right) Q(z), \\ \beta &= 1 + 2\Upsilon, \quad \alpha = \alpha_+, \\ \alpha_+ &= \Upsilon + \frac{gW}{iK}, \quad b_+ = \varkappa + \frac{gm}{iK}. \end{aligned} \quad (14)$$

Уравнение для функции $Q(z)$ представляет собой известное конфлюэнтное гипергеометрическое уравнение.

Пусть $\Upsilon \neq -n/2, n \in \mathbb{N}$. Общее решение конфлюэнтного гипергеометрического уравнения является линейной комбинацией стандартных гипергеометрических функций $\Phi(\alpha, \beta; z)$ и $\Psi(\alpha, \beta; z)$:

$$Q(z) = A\Phi(\alpha, \beta; z) + B\Psi(\alpha, \beta; z), \quad (15)$$

где $A, B = \text{const}$,

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

Затем, используя выражения

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

найдем общее решение системы (14) в виде

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

Окончательно, используя выражения

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

представим общее решение радиальных уравнений (13) в следующей форме:

$$\begin{aligned} F &= AX(\rho, \Upsilon, W) + \\ &+ Bz^\Upsilon e^{-z/2} [\Psi(\alpha, \beta; z)\varrho_+ - b_-\Psi(\alpha+1, \beta; z)\varrho_-], \quad (16) \\ \varrho_\pm &= (\pm 1, i\Lambda)^T, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} X(\rho, \Upsilon, W) &= \frac{(-2iK/m)^{-\Upsilon}}{1-a} z^\Upsilon e^{-z/2} \times \\ &\times \left[\Phi(\alpha, \beta; z)\varrho_+ + a\Phi(\alpha+1, \beta; z)\varrho_- \right] = \\ &= \frac{(m\rho)^\Upsilon}{2} [\Phi_+(\rho, \Upsilon, W) + \Phi_-(\rho, \Upsilon, W) \Xi] d_+, \\ \Phi_+(\rho, \Upsilon, W) &= e^{iK\rho}\Phi(\alpha, 1+2\Upsilon, -2iK\rho) + \\ &+ e^{-iK\rho}\Phi(\alpha_-, 1+2\Upsilon, 2iK\rho), \quad (17) \\ \Phi_-(\rho, \Upsilon, W) &= \frac{1}{iK} \left[e^{iK\rho}\Phi(\alpha, 1+2\Upsilon, -2iK\rho) - \right. \\ &\left. - e^{-iK\rho}\Phi(\alpha_-, 1+2\Upsilon, 2iK\rho) \right], \\ \Xi &= \begin{pmatrix} 0 & m+W \\ m-W & 0 \end{pmatrix}, \quad d_\pm = \left(1, \frac{\kappa \pm \Upsilon}{g} \right)^T. \end{aligned}$$

В дальнейшем будем использовать некоторые частные решения радиальных уравнений (13), соответствующие определенному выбору констант A и B и параметра Υ . Сначала введем новую величину Υ_+ следующим образом:

$$\begin{aligned} \Upsilon_+ &= \Upsilon_+(g, j) = \\ &= \begin{cases} \gamma = \sqrt{\kappa^2 - g^2} \geq 0, & g \leq |\kappa|, \\ i\sigma = i\sqrt{g^2 - \kappa^2}, \quad \sigma > 0, & g > |\kappa|. \end{cases} \quad (18) \end{aligned}$$

Величина Υ_+ как функция параметра g имеет нули в точках $g = g_c(j) = |\kappa| = |j|$.

В случае $\Upsilon_+ \neq 0$ ($g \neq g_c(j)$) имеем два линейно независимых решения F_1 и F_2 , образующих фундаментальную систему решений системы (13):

$$\begin{aligned} F_1(\rho; W) &= X(\rho, \Upsilon_+, W) = \\ &= (m\rho)^{\Upsilon_+} d_+ + O(\rho^{\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0, \\ F_2(\rho; W) &= X(\rho, -\Upsilon_+, W) = \\ &= (m\rho)^{-\Upsilon_+} d_- + O(\rho^{-\Upsilon_++1}), \quad \rho \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (19)$$

Заметим, что оба дублета F_1 и F_2 являются вещественными целыми функциями от W . Их вронскиан равен $\text{Wr}(F_1, F_2) = -2\Upsilon_+g^{-1}$. Если $\text{Im } W > 0$ и $\rho \rightarrow \infty$, то оба дублета $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ экспоненциально растут.

Другое полезное решение F_3 дается выражением (16) при $A = 0, \Upsilon = \Upsilon_+$ и специальном выборе параметра $B = B(W)$,

$$\begin{aligned}
 F_3(\rho; W) &= B(W)z^\Upsilon e^{-z/2} \left[\Psi(\alpha, \beta; z)\varrho_+ - b_- \Psi(\alpha + 1, \beta; z)\varrho_- \right] = \\
 &= \Gamma(-2\Upsilon_+) F_1(\rho; W) - \frac{\omega(W)F_2(\rho; W)}{\text{Wr}(F_1, F_2)}, \\
 \omega(W) &= \frac{\Gamma(1+2\Upsilon_+)\Gamma(-\alpha_-) [igK + (\kappa + \Upsilon_+)(W + m)]}{g\Gamma(\alpha) [igK + (\kappa - \Upsilon_+)(W + m)]} \left(2e^{-i\pi/2} \frac{K}{m} \right)^{-2\Upsilon_+} = -\text{Wr}(F_1, F_3), \\
 B(W) &= \frac{1}{2}\Gamma(-\alpha_-) \left[1 + \frac{(m + W)(\kappa + \Upsilon_+)}{igK} \right] \left(2e^{-i\pi/2} \frac{K}{m} \right)^{-\Upsilon_+}.
 \end{aligned} \tag{20}$$

При $\text{Im } W > 0$ и $\rho \rightarrow \infty$ дублет $F_3(\rho; W)$ убывает экспоненциально (с точностью до полинома).

В специальном случае $\Upsilon_+ = \gamma = 0$ ($g = g_c(j)$), когда дублеты F_1 и F_2 совпадают, будем рассматривать два линейно независимых решения $F_1^{(0)}, F_2^{(0)}$ и их линейную комбинацию $F_3^{(0)}$,

$$\begin{aligned}
 F_1^{(0)}(\rho; W) &= F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} = d_+|_{\gamma=0} + O(\rho), \\
 \rho \rightarrow 0, \quad d_+|_{\gamma=0} &= (1, \zeta(j, s))^T,
 \end{aligned} \tag{21}$$

$$\begin{aligned}
 F_2^{(0)}(\rho; W) &= \partial_\gamma F_1(\rho; W)|_{\gamma=0} - \frac{\zeta(j, s)}{g_c(j)} F_1^{(0)}(\rho; W) = \\
 &= d_0(\rho) + O(\rho \ln \rho), \quad \rho \rightarrow 0,
 \end{aligned} \tag{22}$$

$$\begin{aligned}
 d_0(\rho) &= (\ln(m\rho) - \zeta(j, s)g_c^{-1}(j), \\
 &\quad \zeta(j, s) \ln(m\rho))^T,
 \end{aligned} \tag{23}$$

$$\begin{aligned}
 F_3^{(0)}(\rho; W) &= -\lim_{\gamma \rightarrow 0} F_3(\rho; W) = F_2^{(0)}(\rho; W) + \\
 &+ f(W)F_1^{(0)}(\rho; W), \quad F_3^{(0)} \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+),
 \end{aligned} \tag{24}$$

$$\begin{aligned}
 f(W) &= g_c(j)\omega^{(0)}(W) = \\
 &= \ln(2e^{-i\pi/2}K/m) + \psi(-ig_c(j)WK^{-1}) + \\
 &+ (\zeta(j, s)(W - m) + iK)(2g_c(j)W)^{-1} - 2\psi(1), \\
 \psi(x) &= \Gamma'(x)/\Gamma(x).
 \end{aligned} \tag{25}$$

Соответствующие вронскианы имеют вид

$$\begin{aligned}
 \text{Wr}(F_1^{(0)}, F_2^{(0)}) &= g_c^{-1}(j), \quad \text{Wr}(F_2^{(0)}, F_3^{(0)}) = -\omega^{(0)}, \\
 \text{где } \omega^{(0)} &= \omega^{(0)}(W).
 \end{aligned}$$

5. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ РАДИАЛЬНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ

Здесь полезно вспомнить, что было сказано в конце разд. 3. Поскольку радиальное дифференциальное выражение $\check{h}(Z, j, s)$ в (9) совпадает с радиальным дифференциальным выражением $\hat{h}(Z, j, \zeta)$

в (11), возникающим при решении трехмерной кулоновской задачи в [13], вплоть до замены и другой интерпретации параметров $\kappa \rightarrow \varkappa$, $g \rightarrow q$, мы можем использовать некоторые результаты работ [12–14, 16] относительно с. с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_\epsilon(Z, j, \zeta)$ в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ для определения и спектрального анализа с. с. парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ при замене и соответствующей интерпретации параметров $\varkappa \rightarrow \kappa$, $q \rightarrow g$.

Так как все возможные с. с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ ассоциируются с общим дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$ в (9), см. ниже, их определение сводится к указанию их области определения $D_{h(Z, j, s)} \subset \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Каждый оператор $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ представляет собой с.с. расширение начального симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ в (8), ассоциированного с дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$ в (9), с. с. по Лагранжу, и определенного в пространстве $C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ гладких дублетов с компактным носителем на полуоси \mathbb{R}_+ . В то же время каждый оператор $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ есть с. с. сужение, может быть тривиальное, сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$, который ассоциирован с тем же самым дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$ (так как каждый оператор $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ ассоциируется с одним и тем же дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$) и определен на так называемой естественной области определения $D_{\check{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\check{h}(Z, j, s)$, состоящей из дублетов $F(\rho) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$, абсолютно непрерывных в пространстве \mathbb{R}_+ и таких, что

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

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

Определение с. с. радиальных гамильтонианов $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ существенно зависит от значений параметров Z и j и в особенности от параметра Υ_+ (18).

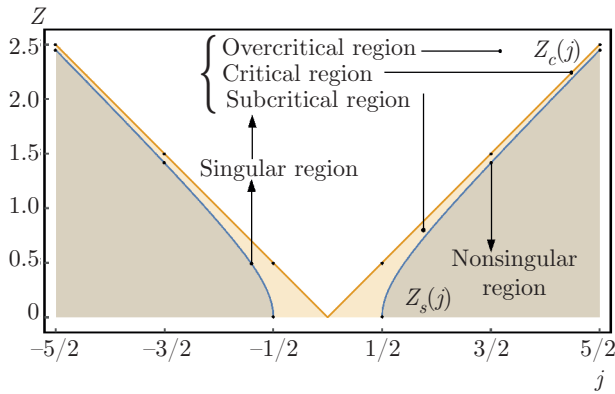


Рис. 1. Области в плоскости (j, Z) : несингулярная (nonsingular region) и сингулярная (singular region). Последняя состоит из субкритической (subcritical region), критической (critical region) и сверхкритической (overcritical region) подобластей

По определению переменная j принимает полуцелые значения, положительные и отрицательные, $j = \pm(n + 1/2)$, $n \in \mathbb{Z}_+$, тогда как переменная Z принимает неотрицательные целые значения, $Z \in \mathbb{Z}_+$. Таким образом, мы имеем дело с дискретными значениями данных переменных в верхней полуплоскости (j, Z) . Однако удобнее рассматривать переменную Z , как величину, принимающую непрерывные значения и лежащую на неотрицательной вертикальной полуоси, $Z \in \mathbb{R}_+$, и возвращаться к ее естественным целочисленным значениям в случае необходимости.

Верхняя полуплоскость (j, Z) (см. рис. 1 для $\alpha_F^{-1}\epsilon = 1$) разбивается на так называемую несингулярную и сингулярную области, в которых проблема нахождения с. с. расширений $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ имеет принципиально разные решения: в несингулярной области с. с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ определяются единственным образом, тогда как в сингулярной области они определяются неоднозначно.

Эти области разделяются симметричной сингулярной кривой $Z = Z_s(j)$, где

$$Z_s(j) = \alpha_F^{-1}\epsilon \sqrt{j^2 - \frac{1}{4}},$$

на которой $g = g_s(j) = \sqrt{j^2 - 1/4}$, или $\Upsilon_+ = \gamma = 1/2$, см. (18); данная кривая состоит из двух ветвей: правая ветвь начинается в точке $(j = 1/2, Z = 0)$ и идет вверх направо, приближаясь к асимптоте $Z = \alpha_F^{-1}\epsilon j$, а левая ветвь начинается в точке $(j = -1/2, Z = 0)$ и идет вверх влево, приближаясь к асимптоте $Z = -\alpha_F^{-1}\epsilon j$. Несингулярная область

(находится внизу) определяется неравенством $Z \leq Z_s(j)$, что эквивалентно $\Upsilon_+ = \gamma \geq 1/2$. Сингулярная область (находится сверху) определяется неравенством $Z > Z_s(j)$, что равносильно $0 \leq \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$ или $\Upsilon_+ = i\sigma$, $\sigma > 0$, см. (18).

Заметим, что сингулярная кривая является верхней границей несингулярной области. Значение $Z_s(j)$ будем называть максимальным несингулярным значением Z для данного j . Для примера приведем первые значения $g_s(j)$ для малых полуцелых j :

$$g_s(\pm 1/2) = 0, \quad g_s(\pm 3/2) = \sqrt{2}, \\ g_s(\pm 5/2) = \sqrt{6}, \quad g_s(\pm 7/2) = 2\sqrt{3}.$$

Далее будем рассматривать с. с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z, j, s)$ в несингулярной и сингулярной областях отдельно.

5.1. Несингулярная область

В несингулярной области, $Z \leq Z_s(j)$, каждый парциальный радиальный гамильтониан обозначим через $\hat{h}_1(Z, j, s)$, где нижний индекс «1» используется вместо индекса ϵ как символ несингулярной области (нижние индексы «2», «3», «4» вместе с другими соответствующими индексами будут использоваться вместо индекса ϵ в качестве индексов, относящихся к определенным подобластям сингулярной области), он определяется единственным образом: $\hat{h}_1(Z, j, s) = \hat{h}_{in}^+(Z, j, s)$. Другими словами, начальный симметрический оператор $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ является существенно с. с. оператором, так как его индексы дефекта равны $(0, 0)$, а область определения оператора $\hat{h}_1(Z, j, s)$ является естественной областью определения для $\check{h}(Z, j, s)$, $D_{\hat{h}_1(Z, j, s)} = D_{\check{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$. Функции, лежащие в $D_{\check{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ имеют следующее асимптотическое поведение в нуле и на бесконечности:

$$F(\rho) = O(\rho^{1/2}) \rightarrow 0, \quad \rho \rightarrow 0; \quad F(\rho) \rightarrow 0, \quad \rho \rightarrow \infty.$$

Заметим, что точки $(j, Z = 0)$ для любого значения j принадлежат несингулярной области, а именно ее нижней границе, из чего следует, что оба полных свободных дираковских гамильтониана \hat{H}_s^1 , $s = \pm 1$, однозначно определяются как с. с. операторы в $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$. Их спектры и (обобщенные) собственные функции хорошо известны.

Возвращаясь к парциальным радиальным гамильтонианам $\hat{h}_1(Z, j, s)$ с $Z \neq 0$, отметим, что несингулярная область (где $\gamma^2 = j^2 - g^2 \geq 1/4$) не содержит точек $j = \pm 1/2$ (напомним, что ветви особой кривой начинаются в точках $(j = 1/2, Z = 0)$

и ($j = -1/2, Z = 0$). Следовательно, парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}_\epsilon(Z, \pm 1/2, s)$ с $Z \neq 0$ не определены однозначно.

Прежде чем перейти к спектрам и (обобщенным) собственным функциям данных парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_1(Z, j, s)$ с $Z \neq 0$ (т.е. $|j| > 1/2: j = \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$), напомним некоторые понятия, связанные с классификацией точек спектра с.с. оператора, следуя математической терминологии, которая, вообще говоря, не совпадает с физической.

Мы называем собственными значениями с.с. оператора только те точки его спектра, которые соответствуют его связанным состояниям, т.е. собственные состояния, волновые функции (дублеты) которых квадратично интегрируемы. Заметим, что в физической литературе любая точка спектра с.с. оператора часто называется его собственным значением. Напомним, что в физической литературе собственные значения гамильтониана условно называют уровнями энергии.

Множество всех собственных значений данного с.с. оператора называется его точечным спектром. Множество всех изолированных собственных значений данного с.с. оператора называется его дискретным спектром. Он, очевидно, является подмножеством точечного спектра, если они не совпадают. В физической литературе понятия точечного и дискретного спектров часто отождествляются.

Замыкание дополнения точечного спектра во всем спектре с.с. оператора называется его непрерывным спектром. В физической литературе, включая учебники, строгое определение непрерывного спектра обычно отсутствует, оно заменяется эвристическими аргументами и примерами.

Может случиться так, что точка спектра с.с. оператора принадлежит его точечному и непрерывному спектрам одновременно. Такая точка спектра не является точкой дискретного спектра.

Спектр каждого парциального радиального гамильтониана $\hat{h}_1(Z, j, s)$ в несингулярной области является простым (невырожденным). Он состоит из непрерывного спектра, занимающего как отрицательную, так и положительную полуоси $(-\infty, -m]$ и $[m, \infty)$, и дискретного спектра, расположенного в интервале $(0, m)$ и состоящего из растущего бесконечного числа энергетических уровней E_n , которые накапливаются в точке m ,

$$\begin{aligned} \text{спек } \hat{h}_1(Z, j, s) &= \\ &= \{E \in (-\infty, -m] \cup [m, \infty)\} \cup \{E_n \in (0, m)\}, \end{aligned}$$

$$E_n = E_{1n}(Z, j, s) = \frac{(n + \gamma)m}{\sqrt{g^2 + (n + \gamma)^2}}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta,$$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_\zeta &= \\ &= \begin{cases} \mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}, & \zeta = 1, \text{ или } sj < 0, \\ \mathbb{Z}_+ = \{0, 1, 2, \dots\}, & \zeta = -1, \text{ или } sj > 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (26)$$

$$\gamma = \sqrt{j^2 - g^2} \geq 1/2, \quad j = \pm 3/2, \pm 5/2, \dots$$

Спектры операторов $\hat{h}_1(Z, j, s)$ можно получить из спектров соответствующих радиальных гамильтонианов $\hat{h}_1(Z, j, \zeta)$ в трехмерном случае (они построены в работах [12–14, 16]) при помощи замен

$$\begin{aligned} j = 1/2, 3/2, \dots &\rightarrow j = \pm 3/2, \pm 5/2, \dots, \\ \zeta = \pm 1 &\rightarrow \zeta = -s \operatorname{sgn}(j), \\ \gamma = \sqrt{(j + 1/2)^2 - g^2} &\rightarrow \gamma = \sqrt{j^2 - g^2}. \end{aligned}$$

Отметим, что дискретные энергетические уровни с данными Z и j не зависят от s и формально совпадают при $s = \pm 1$, но множества \mathcal{N}_ζ , последовательности целых чисел n , обозначающие энергетические уровни, различаются (т.е. для разных значений переменной $\zeta = -s \operatorname{sgn}(j) = \pm 1$) первым членом. В дальнейшем будем говорить, что множество \mathcal{N}_1 принадлежит сектору $\zeta = +1$, а множество \mathcal{N}_{-1} — сектору $\zeta = -1$.

Ортонормированные (обобщенные) собственные функции $U_{1E}(\rho)$, $|E| \geq m$, непрерывного спектра и ортонормированные собственные функции $U_{1n}(\rho)$ связанных состояний с энергией E_n , отвечающие парциальным радиальным гамильтонианам $\hat{h}_1(Z, j, s)$, образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения (см. [13]) и имеют вид

$$\begin{aligned} U_{1E}(\rho) &= Q_E F_1(\rho; E), \quad Q_E > 0, \quad |E| \geq m, \\ U_{1n}(\rho) &= Q_n F_1(\rho; E_n), \quad n \in \mathcal{N}_\zeta, \quad 0 < E < m, \end{aligned} \quad (27)$$

где дублет $F_1(\rho; E)$ определяется в (17) и (19),

$$\begin{aligned} Q_E^2 &= \\ &= \frac{2\pi g^2 k (|E| - \operatorname{sgn}(E)m) (2k/m)^{2\gamma} e^{\pi g E/k}}{\Gamma^2(2\gamma + 1) |\Gamma(-\gamma + i \frac{g}{k} |E|)|^2} \times \\ &\quad \times ((\kappa + \gamma)^2 k^2 + g^2 (E - m)^2)^{-1} \times \\ &\quad \times \left(\operatorname{ch} \left(2\pi \frac{g}{k} E \right) - \cos(2\pi\gamma) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} Q_n^2 &= \frac{\Gamma(2\gamma + 1 + n) \tau_n^3 (2\tau_n/m)^{2\gamma}}{m^2 n! \Gamma^2(2\gamma + 1)} \times \\ &\quad \times \frac{g(m - E_n) - (\kappa - \gamma)\tau_n}{g(m - E_n) - (\kappa + \gamma)\tau_n}, \\ k &= \sqrt{E^2 - m^2}, \quad \tau_n = gm[g^2 + (n + \gamma)^2]^{-1/2}. \end{aligned}$$

В заключение отметим, что справедливо равенство $\hat{h}_1(Z, j, s) = \hat{h}_1(Z, -j, -s)$.

5.2. Сингулярная область

В сингулярной области, находящейся в верхней плоскости изменения параметров (j, Z) , $Z > Z_s(j)$ (что эквивалентно $\Upsilon_+^2 = j^2 - g^2 < 1/4$), с. с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}_c(Z, j, s)$ как с. с. расширения начальных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ не определены однозначно для каждой тройки параметров Z, j и s . Причина состоит в том, что индексы дефекта m_+, m_- каждого симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ равны $(1, 1)$ и, следовательно, существует однопараметрическое семейство расширений, так что с. с. парциальные радиальные гамильтонианы параметризуются параметром $\nu \in [-\pi/2, \pi/2]$, $-\pi/2 \sim \pi/2$. Парциальные радиальные гамильтонианы с одинаковыми значениями параметров Z, j и s , но с разными значениями ν ассоциированы с одним и тем же дифференциальным выражением $\check{h}(Z, j, s)$, но различаются областями определения, которые являются подмножествами естественной области определения $D_{\check{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+)$ для $\check{h}(Z, j, s)$ и задаются некоторыми асимптотическими граничными условиями в начале координат, которые явно содержат параметр ν .

Как и в трехмерной кулоновской задаче, мы делим сингулярную область на три подмножества: субкритическую, критическую и сверхкритическую подобласти, которые различаются характером асимптотических с. с. граничных условий в начале координат.

Обозначим через $\hat{h}_{k\nu}$, $k = 2, 3, 4$, с. с. парциальные радиальные гамильтонианы в субкритической $k = 2$, критической $k = 3$ и сверхкритической $k = 4$ подобластях соответственно (для краткости опускаем здесь аргументы Z, j, s). С. с. граничные условия, задающие гамильтонианы $\hat{h}_{k\nu}$, не сильно отличаются друг от друга для разных подобластей сингулярной области. И решение спектральной задачи для оператора $\hat{h}_{k\nu}$ при разных k проводится аналогичным образом.

Для полноты изложения кратко напомним основные моменты спектрального анализа с. с. радиальных гамильтонианов $\hat{h}_{k\nu}$, основанные на методе направляющих функционалов Крейна, подробнее см. [13].

Заранее скажем, что во всех трех подобластях сингулярной области для каждого оператора $\hat{h}_{k\nu}$ существует простой направляющий функционал. Отсюда следует, что спектр оператора $\hat{h}_{k\nu}$ является

простым (невыврожденным в физической терминологии). В таком случае основным инструментом спектрального анализа является спектральная функция $\sigma_{k\nu}(E)$ и ее (обобщенная) производная $\sigma'_{k\nu}(E)$, где $E \in \mathbb{R}$ — вещественная переменная. По определению, функция $\sigma'_{k\nu}(E)$ определяется выражением

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

где функция $\omega_{k\nu}(W)$, $W = E + iy \in \mathbb{C}$, $y \neq 0$, определяется функцией Грина оператора $\hat{h}_{k\nu}$, а именно, из множителя в представлении функции Грина в виде произведения дублетов $U_{k\nu}(\rho; W)$ и $F_3(\rho; W)$ (20). Дублет $U_{k\nu}(\rho; W)$ является линейной комбинацией дублетов $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ (19), удовлетворяющей асимптотическим с. с. граничным условиям. Отметим, что функция Грина является ядром интегрального представления резольвенты $(\hat{h}_{k\nu} - W)^{-1}$ оператора $\hat{h}_{k\nu}$.

Спектр оператора $\hat{h}_{k\nu}$ является носителем функции $\sigma'_{k\nu}(E)$ и ограничение $U_{k\nu}(\rho; E)$ дублета $U_{k\nu}(\rho; W)$ на точку спектра E оператора $\hat{h}_{k\nu}$ является соответствующей собственной функцией оператора $\hat{h}_{k\nu}$.

В частности, функция $\sigma'_{k\nu}$ в точке E_n , являющейся простым нулем вещественной функции $\omega_{k\nu}(E)$, $\omega_{k\nu}(E_n) = 0$, $\operatorname{Im} \omega_{k\nu}(E) = 0$, $|E - E_n| < \delta$, имеет особенность типа дельта-функции. А точка E_n является собственным значением соответствующего парциального гамильтониана.

Точки E , в которых функция $\omega_{k\nu}(E)$ отлична от нуля, непрерывна и принимает комплексные значения, являются точками непрерывного спектра оператора $\hat{h}_{k\nu}$. В данных точках спектра функция $\sigma'_{k\nu}(E)$ положительна, $\sigma'_{k\nu}(E) = Q_{k\nu}^2(E) > 0$, где $Q_{k\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{k\nu}(E)}$ — нормировочный множитель для соответствующей (обобщенной) собственной функции $U_{k\nu}(\rho; E)$ непрерывного спектра. Заранее скажем, что во всех трех подобластях сингулярной области непрерывный спектр каждого оператора $\hat{h}_{k\nu}$ представляет собой объединение двух полуосей $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$.

В интервале $(-m, m)$ любая функция $\omega_{k\nu}(E)$ принимает вещественные значения, но она имеет изолированные простые нули в некоторых точках $E_{kn}(\nu)$, $\omega_{k\nu}(E_{kn}(\nu)) = 0$, $n = 1, 2, \dots$ (нумерация может быть разной, см. ниже). Эти точки являются изолированными собственными значениями оператора $\hat{h}_{k\nu}$, формирующими его дискретный спектр, а дублеты $U_{k\nu}(\rho; E_{kn}(\nu))$ представляют собой соответствующие (нормированные) собственные функции.

Действительно, в окрестности точек $E_{kn}(\nu)$ функция $1/\omega_{k\nu}(E+i0)$ имеет вид

$$\frac{1}{\omega_{k\nu}(E+i0)} = -\frac{Q_{k\nu,n}^2}{E-E_{kn}(\nu)+i0} + O(1),$$

$$Q_{k\nu,n}^2 = -\frac{1}{\omega'_{k\nu}(E_{kn}(\nu))} > 0,$$

так что $\sigma'_{k\nu}(E) = Q_{k\nu,n}^2 \delta(E-E_{kn}(\nu))$, $Q_{k\nu,n} > 0$ — нормировочный множитель для собственной функции $U_{k\nu}(\rho; E_{kn}(\nu))$. Во всех трех подобластях сингулярной области дискретный спектр $\{E_{kn}(\nu)\}$ представляет собой бесконечный набор возрастающих собственных значений (уровней энергии), стремящихся к точке $E = m$.

Примечательно, что для каждого семейства $\{\hat{h}_{k\nu}(Z, j, s)\}$ парциальных радиальных гамильтонианов с данным k существует некоторое значение $\nu = \nu_{-m}$ параметра расширения, такое что $\omega_{k\nu_{-m}}(-m) = 0$, а точка $E = -m$ — собственное значение оператора $\hat{h}_{k\nu_{-m}}$ с соответствующей нормированной собственной функцией $U_{k\nu_{-m}}(\rho; -m)$, т. е. данная точка принадлежит точечному спектру оператора $\hat{h}_{k\nu_{-m}}$. При этом данная точка $E = -m$ также принадлежит непрерывному спектру оператора $\hat{h}_{k\nu_{-m}}$ и является верхней границей его нижней ветви. Таким образом, мы сталкиваемся с упомянутым выше случаем, когда гамильтониан $\hat{h}_{k\nu_{-m}}$ имеет нетривиальный точечный спектр, который не сводится к чисто дискретному спектру.

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{k\nu,E}(\rho) = Q_{k\nu}(E)U_{k\nu}(\rho; E)$ непрерывного спектра (в физической терминологии они «нормируются на дельта-функцию») и нормированные собственные функции $U_{k\nu,n}(\rho) = Q_{k\nu,n}U_{k\nu}(\rho; E_{kn}(\nu))$ дискретного спектра образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения. Будем называть функцию $\omega_{\nu k}(E)$ базисной функцией, а дублет $U_{k\nu}(\rho; W)$ — базисным.

Отметим, что спектральный анализ в несингулярной области (мы приведем только его результаты) проводится аналогичным образом. В качестве базовой функции берется функция $\omega(W)/\Gamma(-2\gamma)$, где $\omega(W)$ задается выражением (20) вместо $\omega_{k\nu}(W)$, а базовый дублет $F_1(\rho; W)$ — выражением (19) вместо $U_{k\nu}(\rho; W)$.

Далее мы рассмотрим парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}_{k\nu}$, исследуем их точечный спектр и кратко опишем результаты спектрального анализа для каждой сингулярной подобласти.

5.2.1. Субкритическая область

Субкритическая область в верхней полуплоскости (j, Z) определяется неравенствами $Z_s(j) < Z < Z_c(j)$, что эквивалентно $0 < \Upsilon_+ = \gamma < 1/2$, где $Z_c(j) = \alpha_F^{-1} \epsilon |j|$, т. е. $g = g_c(j) = |j|$ и $\gamma = 0$, см. рис. 1.

Значение $Z_c(j)$ будем называть критическим значением Z для данного j . Для примера выпишем несколько первых значений $g_c(j)$ для малых полных j :

$$g_c(\pm 1/2) = 0.5, \quad g_c(\pm 3/2) = 1.5, \quad g_c(\pm 5/2) = 2.5.$$

В субкритической области с. с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}_{2\nu}(Z, j, s)$ характеризуются с. с. граничными условиями в начале координат следующим образом:

$$F(\rho) = c[(m\rho)^\gamma d_+ \cos \nu + (m\rho)^{-\gamma} \times \\ \times d_- \sin \nu] + O(\rho^{1/2}), \quad (29)$$

$$d_\pm = (1, (\kappa \pm \gamma)/g)^T, \quad \rho \rightarrow 0,$$

где c — произвольное комплексное число. Область определения $D_{h_{2\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{2\nu}(Z, j, s)$ есть

$$D_{h_{2\nu}(Z,j,s)} = \{F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z,j,s)}^*(\mathbb{R}_+) \text{ и} \\ F \text{ удовлетворяет (29)}\}.$$

Базисная функция $\omega_{2\nu}(W)$ и дублет $U_{2\nu}(\rho; W)$ определяются соотношениями

$$\omega_{2\nu}(W) = \frac{2\gamma}{g} \frac{\omega(W) \cos \nu + g^{-1} \Gamma(1-2\gamma) \sin \nu}{\omega(W) \sin \nu - g^{-1} \Gamma(1-2\gamma) \cos \nu},$$

где функция $\omega(W)$ дана в (20), и

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

Дублеты $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ определены в (19). Производная $\sigma'_{2\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

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

Не составляет трудности найти носитель функции $\sigma'_{2\nu}(E)$ и простой спектр гамильтониана $\hat{h}_{2\nu}(Z, j, s)$,

$$\operatorname{spec} \hat{h}_{2\nu}(Z, j, s) = \\ = \{E \in (-\infty, -m] \cup [m, \infty)\} \cup \{E_{2n}(\nu) \in [-m, m)\},$$

который состоит из непрерывного $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$ и точечного спектров. Точечный спектр представляет собой возрастающую бесконечную последовательность $\{E_{2n}(\nu) = E_{2n}(Z, j, s; \nu)\}$ энергетических

уровней $E_{2n}(Z, j, s; \nu)$, расположенных на полуинтервале $[-m, m)$ и стремящихся к $E = m$. Энергетические уровни определяются как корни уравнения

$$\omega_{2\nu}(E) = \frac{2\gamma \omega(E) \cos \nu + g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \sin \nu}{g \omega(E) \sin \nu - g^{-1}\Gamma(1 - 2\gamma) \cos \nu} = 0, \quad E \in [-m, m). \quad (30)$$

Отметим, что множество $\{n\}$ целых чисел n , нумерующих энергетические уровни, зависит от параметра s (так же как в несингулярной области).

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{2\nu, E}(\rho)$, соответствующие непрерывному спектру, и нормированные собственные функции $U_{2\nu, n}(\rho)$, относящиеся к точечному спектру, даются выражениями

$$\begin{aligned} U_{2\nu, E}(\rho) &= Q_{2\nu}(E)U_{2\nu}(\rho; E) = \\ &= Q_{2\nu}(E) (F_1(\rho; E) \cos \nu + F_2(\rho; E) \sin \nu), \\ E &\in (-\infty, -m) \cup [m, \infty); \\ U_{2\nu, n}(\rho) &= Q_{2\nu, n}U_{2\nu}(\rho; E_{2n}(\nu)) = \\ &= Q_{2\nu, n} (F_1(\rho; E_{2n}(\nu)) \cos \nu + \\ &+ F_2(\rho; E_{2n}(\nu)) \sin \nu), \end{aligned} \quad (31)$$

где

$$Q_{2\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{2\nu}(E)}, \quad Q_{2\nu, n} = \sqrt{-\frac{1}{\omega'_{2\nu}(E_{2n}(\nu))}},$$

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

Явные выражения для спектра и собственных функций, включая точное решение уравнения (30), можно получить в двух случаях: когда $\nu = \pm\pi/2$ и $\nu = 0$.

1. Пусть $\nu = \pm\pi/2$. Тогда

$$\begin{aligned} \omega_{2\nu}(W)|_{\nu=\pm\pi/2} &= \frac{2\gamma}{g^2} \frac{\Gamma(1 - 2\gamma)}{\omega(W)}, \\ U_{2\nu}(\rho, W)|_{\nu=\pm\pi/2} &= F_2(\rho; W). \end{aligned}$$

Как говорилось выше, спектральный анализ в несингулярной области строится по базисной функции $\omega(W)/\Gamma(-2\gamma)$ и базисному дублету $F_1(\rho; W)$. Заметим, что

$$\begin{aligned} \frac{2\gamma}{g^2} \frac{\Gamma(1 - 2\gamma)}{\omega(W)} &= \frac{\omega(W)}{\Gamma(-2\gamma)} \Big|_{\gamma \rightarrow -\gamma}, \\ F_2(\rho; W) &= F_1(\rho; W) \Big|_{\gamma \rightarrow -\gamma}. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что все результаты, касающиеся спектра и собственных функций, могут быть получены из результатов для случая несингулярной области, включая (26), (27), с помощью формальной

замены $\gamma \rightarrow -\gamma$. В частности, дискретный спектр задается выражением

$$\mathcal{E}_{2n} = E_{2n}(\pm\pi/2) = \frac{(n - \gamma)m}{\sqrt{g^2 + (n - \gamma)^2}}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta, \quad (32)$$

где \mathcal{N}_ζ определено в (26). Отметим, что неявная зависимость дискретных энергетических уровней \mathcal{E}_{2n} от s проявляется на множестве \mathcal{N}_ζ целых чисел n , нумерующих уровни энергии, согласно формуле (26).

2. Пусть $\nu = 0$. В этом случае имеем

$$\begin{aligned} \omega_{2\nu}(W)|_{\nu=0} &= -\frac{2\gamma}{\Gamma(1 - 2\gamma)}\omega(W) = \frac{\omega(W)}{\Gamma(-2\gamma)}, \\ U_{2\nu}(\rho, W)|_{\nu=0} &= F_1(\rho; W). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что в случае $\nu = 0$ все результаты, касающиеся спектра и собственных функций, являются прямым обобщением соответствующих результатов, включая (26), (27), (28) для несингулярной области, где $\gamma \geq 1/2$, на субкритическую область, где $0 < \gamma < 1/2$.

Исследование общего случая $|\nu| < \pi/2$ полностью аналогично тому, которое выполнено для сингулярной области в трехмерной кулоновской задаче (см. [13]). Мы приведем только самые важные свойства точечного спектра. Во-первых, для каждого Z, j, s и $\nu \neq \nu_{-m}$, см. (33), точечный спектр является чисто дискретным. При $\nu = \nu_{-m}$ дискретный спектр дополняется энергетическим уровнем $E = -m$, который одновременно является точкой непрерывного спектра (верхней границей его нижней ветви). Значение ν_{-m} можно определить из уравнения (30), полагая $E = -m$ и учитывая, что $\omega(-m) = g^{-1}\Gamma(1 + 2\gamma)(2g)^{-2\gamma}$:

$$\text{tg } \nu_{-m} = -\frac{\Gamma(1 + 2\gamma)}{\Gamma(1 - 2\gamma)}(2g)^{-2\gamma}. \quad (33)$$

Отметим, что $\nu_{-m} = \nu_{-m}(Z, j)$ зависит только от $|j|$ и не зависит от параметра s .

Для иллюстрации на рис. 2 приведен график изменения параметра ν_{-m} как функции от g для фиксированного $j = \pm 1/2$.

Во-вторых, как следует из (9) и подтверждается (26) и (32), следует различать секторы $\zeta = 1$ и $\zeta = -1$ уровней энергии, в частности, из-за различных последовательностей целых чисел \mathcal{N}_ζ , см. комментарий к формуле (26). Более того, становится очевидной зависимость энергетических уровней $E_{2n}(Z, j, s; \nu)$ от параметра s в общем случае $0 < |\nu| < \pi/2$.

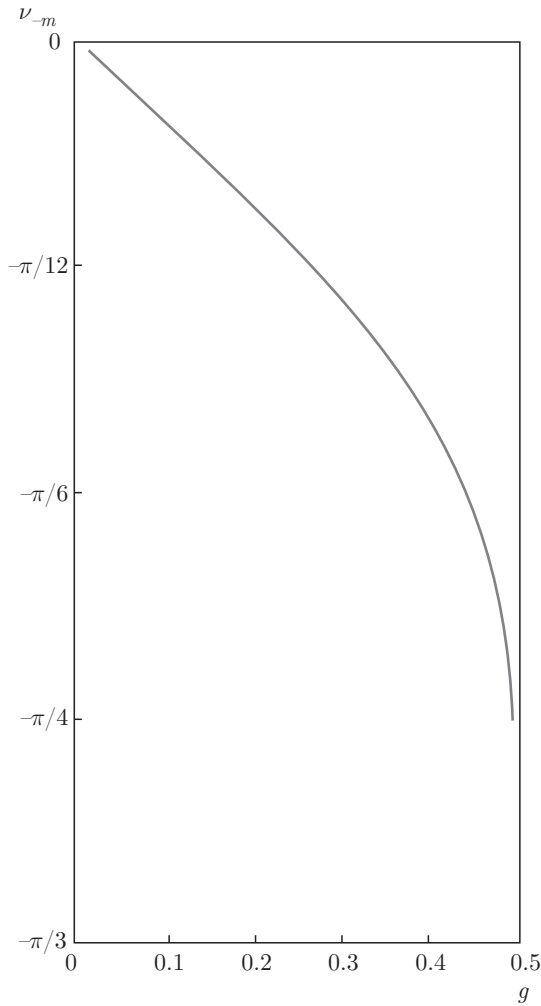


Рис. 2. Зависимость ν_{-m} от g для $j = 1/2$

Обозначим через n_ζ первый член в последовательности \mathcal{N}_ζ : $n_1 = 1, n_{-1} = 0$. Следует подчеркнуть, что в каждом секторе самый низкий энергетический уровень $E = -m$ соответствует одному и тому же значению ν_{-m} (33), в частности $\mathcal{E}_{2n_\zeta} > -m$. Обозначим этот уровень как $E_{2(n_\zeta-1)}(\nu_{-m})$.

В полуинтервале энергий $[-m, \mathcal{E}_{2n_\zeta}]$ для каждого значения $\nu \in (-\pi/2, \nu_{-m}]$ существует один уровень энергии $E_{2(n_\zeta-1)}(\nu)$, который монотонно увеличивается от $-m$ до $\mathcal{E}_{2n_\zeta} - 0$, когда значение ν меняется от ν_{-m} до $-\pi/2 + 0$. Для значений $\nu \in (\nu_{-m}, \pi/2)$ данный уровень энергии отсутствует. В каждом энергетическом интервале $\mathcal{E}_{2n}, \mathcal{E}_{2(n+1)}, n \geq n_\zeta$, для любого значения $\nu \in (-\pi/2, \pi/2)$ существует один уровень $E_{2n}(\nu)$, монотонно возрастающий от $\mathcal{E}_{2n} + 0$ до $\mathcal{E}_{2(n+1)} - 0$ при изменении ν от $\pi/2 - 0$ до $-\pi/2 + 0$. Стоит отметить, что

$$\lim_{\nu \rightarrow -\pi/2} E_{2(n-1)}(\nu) = \lim_{\nu \rightarrow \pi/2} E_{2n}(\nu) = \mathcal{E}_{2n}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta.$$

На рис. 3 приведены графики нижних энергетических уровней для $j = 1/2$ и $g = 0.4$ как функций параметра ν для $s = \pm 1$.

В заключение отметим, что имеет место замечательное равенство

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

так как с. с. граничные условия (29) инвариантны относительно замены $j \rightarrow -j, s \rightarrow -s$.

5.2.2. Критическая область

Критическая область представляет собой критическую кривую $Z = Z_c(j)$, что равносильно $g = g_c(j)$ или $\Upsilon_+ = \gamma = 0$. Отметим, что в данной области физические значения пар j (полуцелое число) и Z (целое число) лежат на критической кривой для очень специальных значений «постоянной тонкой структуры» в графене $\alpha_F/\epsilon, \alpha_F/\epsilon = |j|/Z$. В частности, если α_F/ϵ — иррациональное число, никакая физическая пара (j, Z) не лежит на критической кривой. В этой области с. с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}_{3\nu}(Z, j, s)$ задаются асимптотически с. с. граничными условиями в начале координат в виде

$$F(\rho) = c[d_0(\rho) \cos \nu + d_+ \sin \nu] + O(\rho^{1/2} \ln \rho), \quad (34)$$

$$\rho \rightarrow 0, \quad \nu \in [-\pi/2, \pi/2], \quad -\pi/2 \sim \pi/2,$$

где постоянный дублет $d_+ = d_+|_{\gamma=0}$ и дублет $d_0(\rho)$, зависящий от ρ , определяются соотношениями (21) и (23) соответственно. Область определения $D_{h_{3\nu}(Z, j, s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{3\nu}(Z, j, s)$ есть

$$D_{h_{3\nu}(Z, j, s)} = \{F(\rho) : F(\rho) \in D_{\hat{h}(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+) \text{ и } F \text{ удовлетворяет (34)}\}.$$

Базисная функция $\omega_{3\nu}(W)$ имеет вид

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

где функция $f(W)$ определена в (25). Базисный дублет $U_{3\nu}(W)$ определяется выражением

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

где дублеты $F_1^{(0)}(\rho, W)$ и $F_2^{(0)}(\rho, W)$ даны в (21) и (22), (23) соответственно. Причем в качестве дублета $F_3(\rho, W)$ берем дублет $F_3^{(0)}(\rho, W)$, определенный в (24) и (25). Производная $\sigma'_{3\nu}(E)$ спектральной функции имеет вид

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

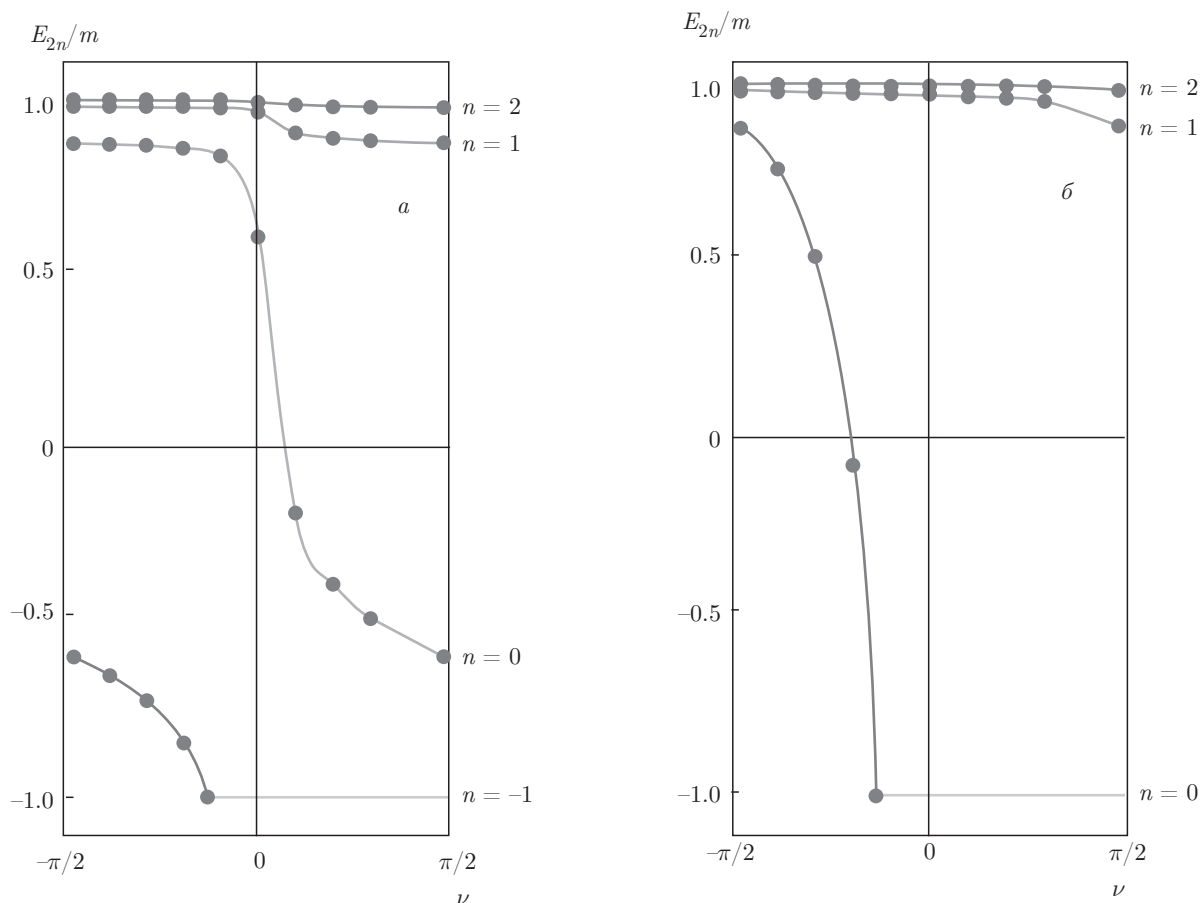


Рис. 3. Зависимости энергетических уровней E_{2n} от параметра ν для $s = 1$ (а), -1 (б)

Для вычисления функции $\sigma'_{3\nu}(E)$ требуется выражение для сужения $f(E) = f(E + i0)$ функции $f(W)$ (24) на действительную ось. Для $|E| \geq m$ имеем

$$f(E) = \ln \left(2e^{-i\epsilon\pi/2} \frac{k}{m} \right) + \psi \left(-ig_c(j) \frac{|E|}{k} \right) + \frac{\zeta(E-m) + i\epsilon k}{2g_c(j)E} - 2\psi(1), \quad |E| \geq m,$$

а для $|E| < m$ получаем

$$f(E) = \ln \left(2 \frac{\tau}{m} \right) + \psi \left(-g_c(j) \frac{E}{\tau} \right) + \frac{\zeta(E-m) - \tau}{2g_c(j)E} - 2\psi(1), \quad |E| < m, \quad (35)$$

где

$$k = \sqrt{E^2 - m^2}, \quad \tau = \sqrt{m^2 - E^2}, \\ \epsilon = \text{sgn}(E), \quad \zeta = \zeta(j, s), \quad \psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z).$$

Определение носителя функции $\sigma'_{3\nu}(E)$ и вычисление соответствующих величин (что довольно утомительно) приводит к заключению, что простой спектр гамильтониана $\hat{h}_{3\nu}(Z, j, s)$ дается выражением

$$\text{spec } \hat{h}_{3\nu}(Z, j, s) = \{E \in (-\infty, -m] \cup [m, \infty)\} \cup \{E_{3n}(\nu) \in [-m, m)\}$$

и состоит из непрерывного $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$ и точечного спектров. Точечный спектр представляет собой возрастающую бесконечную последовательность $\{E_{3n}(\nu) = E_{3n}(Z, j, s; \nu)\}$ энергетических уровней $E_{3n}(Z, j, s; \nu)$, которые определяются как корни уравнения $\omega_{3\nu}(E) = 0$, $E \in [-m, m)$, которое эквивалентно уравнению

$$\frac{f(E) \cos \nu - \sin \nu}{f(E) \sin \nu + \cos \nu} = 0, \quad |E| < m. \quad (36)$$

Данные энергетические уровни локализованы на полуинтервале $[-m, m)$ и накапливаются в точке $E = m$. Зависимость бесконечной последовательности

ти $\{n\}$ целых чисел n , нумерующих энергетические уровни, от параметра s будет исследована ниже.

Из (36) и (35) следует, что энергетические уровни с заданными значениями Z, j явно зависят от ζ , т. е. от s . Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{3\nu, E}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, и нормированные собственные функции $U_{3\nu, n}(\rho)$, относящиеся к точечному спектру, имеют вид

$$\begin{aligned} U_{3\nu, E}(\rho) &= Q_{3\nu}(E)U_{3\nu}(\rho; E) = \\ &= Q_{3\nu}(E) \left(F_1^{(0)}(\rho; E) \cos \nu + F_2^{(0)}(\rho; E) \sin \nu \right), \\ E &\in (-\infty, -m] \cup [m, \infty); \\ U_{3\nu, n}(\rho) &= Q_{3\nu, n}U_{3\nu}(\rho; E_{3n}(\nu)) = \\ &= Q_{3\nu, n} \left(F_1^{(0)}(\rho; E_{2n}(\nu)) \cos \nu + \right. \\ &\quad \left. + F_2^{(0)}(\rho; E_{2n}(\nu)) \sin \nu \right), \end{aligned} \tag{37}$$

где

$$Q_{3\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{3\nu}(E)}, \quad Q_{3\nu, n} = \sqrt{-\frac{1}{\omega'_{3\nu}(E_{3n}(\nu))}},$$

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

Для случая $\nu = \pm\pi/2$ имеем явные выражения для спектра и собственных функций:

$$\begin{aligned} \omega_{3\nu}(W)|_{\nu=\pm\pi/2} &= -\frac{1}{g_c(j)f(W)}, \\ U_{3\nu}(W)|_{\nu=\pm\pi/2} &= F_1^{(0)}(\rho, W) = F_1(\rho, W)|_{\gamma=0}, \\ \sigma'_{3\nu}(E)|_{\nu=\pm\pi/2} &= -\frac{g_c(j)}{\pi} \operatorname{Im} f(E + i0). \end{aligned}$$

В диапазоне $|E| \geq m$, когда спектр непрерывен, используя выражение (35) для функции $f(E)$ и соотношение $\psi(z) - \psi(-z) = -\pi \operatorname{ctg}(\pi z) - z^{-1}$, получим

$$\begin{aligned} \sigma'_{3\nu}(E)|_{\nu=\pm\pi/2} &= Q_{3\nu}^2(E)|_{\nu=\pm\pi/2} = \\ &= \frac{g_c(j)}{2} \left(\operatorname{cth}(\pi g_c(j) \frac{|E|}{k}) + \epsilon \right), \quad |E| \geq m. \end{aligned}$$

Заметим, что $\sigma'_{3\nu}(E)|_{\nu=\pm\pi/2} \geq 0$ для $|E| \geq m$, как и должно быть. А квадрат нормировочного множителя $Q_{3\nu}^2(E)|_{\nu=\pm\pi/2}$ для собственных функций $U_{3\nu}(\rho; E)|_{\nu=\pm\pi/2} = F_1^{(0)}(\rho, E)$, отвечающих непрерывному спектру, неотрицателен.

Для $|E| < m$, используя выражение (35) для $f(E)$ и учитывая, что полюсы функции $\sigma'_{3\nu}(E)|_{\nu=\pm\pi/2}$, определяющие энергетические уровни гамильтонианов, представлены полюсами

функции $\psi(-z)$ в точках $z_n = n, n \in \mathbb{Z}_+$, и полюсом в третьем члене в правой части выражения (35) при $\zeta = 1$ в точке $E = 0$, получим

$$\sigma'_{3\nu}(E)|_{\nu=\pm\pi/2} = \sum_{n \in \mathcal{N}_\zeta} Q_{3\nu, n}^2|_{\nu=\pm\pi/2} \delta(E - \mathcal{E}_{3n});$$

здесь нормировочные множители $Q_{3\nu, n}|_{\nu=\pm\pi/2}$ для собственных функций $U_{3\nu}(\rho; \mathcal{E}_{3n})|_{\nu=\pm\pi/2} = F_1^{(0)}(\rho, \mathcal{E}_{3n})$ связанных состояний определяются выражениями

$$Q_{3\nu, n}|_{\nu=\pm\pi/2} = \frac{\tau_n^{3/2}}{m}, \quad \tau_n = \frac{g_c(j)m}{\sqrt{g_c^2(j) + n^2}}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta.$$

Соответствующие дискретные энергетические уровни $\mathcal{E}_{3n} = E_{3n}(\nu = \pm\pi/2)$ есть

$$\mathcal{E}_{3n} = \frac{nm}{\sqrt{g_c^2(j) + n^2}}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta.$$

Отметим, что все результаты для спектра и собственных функций в критической области $\gamma = 0$ для случая $\nu = \pm\pi/2$ получаются из соответствующих результатов для несингулярной области, включая (26)–(28), путем предельного перехода к точке $\gamma = 0$.

Что касается общего случая $|\nu| < \pi/2$, мы приведем только наиболее важные свойства дискретного спектра, которые аналогичны результатам, полученным для субкритической области.

Во-первых, для любых значений j, s в критической области (где Z однозначно определяется j) и $\nu \neq \nu_m$ (см. (38) ниже) точечный спектр является чисто дискретным. При $\nu = \nu_m$ дискретный спектр дополняется энергетическим уровнем $E = -m$, который одновременно является точкой непрерывного спектра, а именно, верхней границей его нижней ветви. Данное значение $\nu_m = \nu_m(|j|, \zeta)$ определяется из уравнения (36), в котором положим $E = -m$ и учтем, что $f(-m) = \ln(2g_c(j)) - 2\psi(1) + \zeta/g_c(j)$:

$$\operatorname{tg} \nu_m(|j|, \zeta) = \ln(2g_c(j)) - 2\psi(1) + \frac{\zeta}{g_c(j)}. \tag{38}$$

Примечательно, что параметр ν_m как функция от j и ζ зависит только от $|j|$. Также стоит отметить, что для $\nu_m(|j|, \zeta)$ справедливы неравенства

$$\begin{aligned} \nu_m(|j|, 1) &> \nu_m(|j|, -1), \quad \nu_m(|j|, 1) > 0 \quad \forall j; \\ \nu_m(1/2, -1) &< 0; \quad \nu_m(|j|, -1) > 0, \quad |j| > 3/2. \end{aligned}$$

Во-вторых, для заданных значений j, ζ в полуинтервале энергий $[-m, \mathcal{E}_{2n_\zeta})$ (напомним, что $n_\zeta = 1$

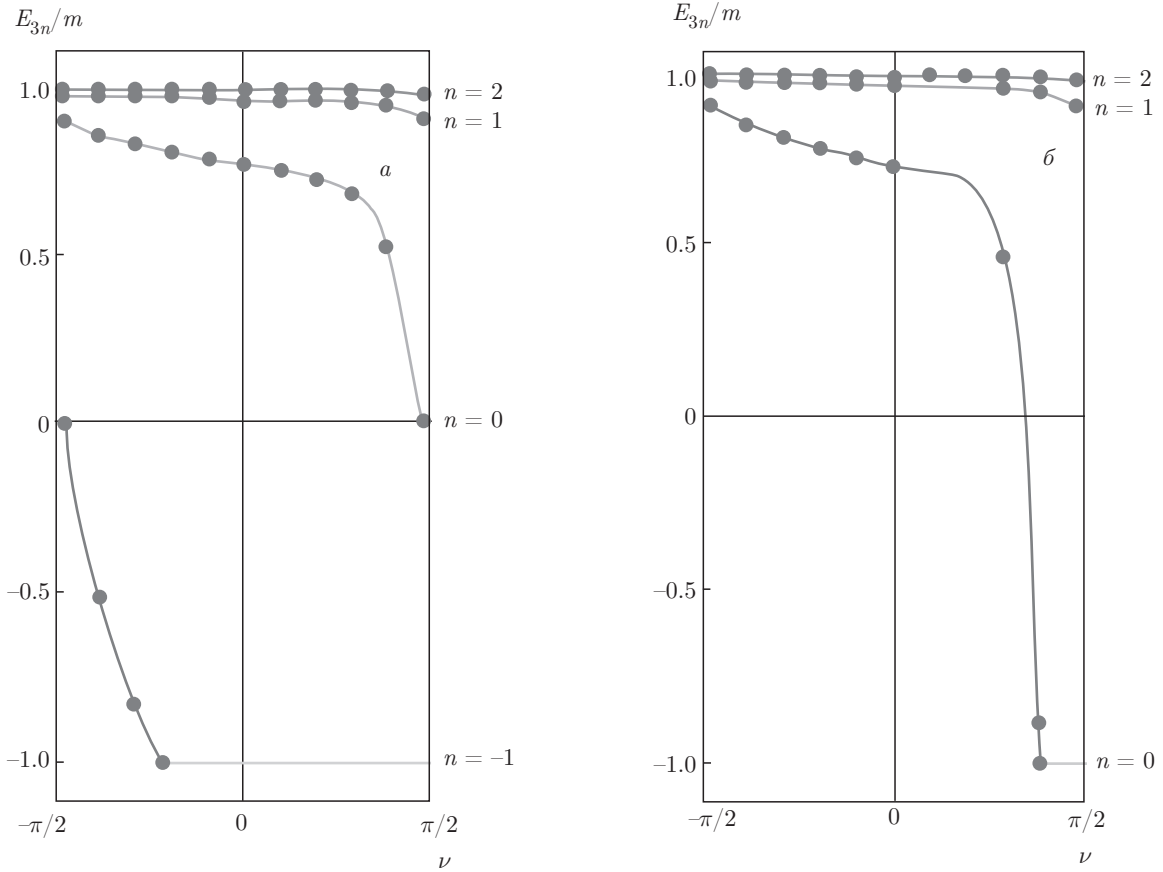


Рис. 4. Зависимости энергетических уровней E_{3n} от параметра ν для $s = 1$ (а), -1 (б)

для $\zeta = 1$ и $n_\zeta = 0$ для $\zeta = -1$) для всех $\nu \in (-\pi/2, \nu_{-m}(|j|, \zeta)]$, где $\nu_{-m}(|j|, \zeta)$ дано в (38), существует один энергетический уровень $E_{3(n_\zeta-1)}(\nu)$, который монотонно возрастает от $-m$ до $\mathcal{E}_{3n_\zeta} - 0$ при изменении ν от $\nu_{-m}(|j|, \zeta)$ до $-\pi/2 + 0$, тогда как при $\nu \in (\nu_{-m}(|j|, \zeta), \pi/2)$ энергетических уровней нет. Для каждого интервала $(\mathcal{E}_{3n}, \mathcal{E}_{3(n+1)})$, $n \geq n_\zeta$, при $\nu \in (-\pi/2, \pi/2)$ существует энергетический уровень $E_{3n}(\nu)$, монотонно возрастающий от $\mathcal{E}_{3n} + 0$ до $\mathcal{E}_{3(n+1)} - 0$, когда параметр ν меняется от $\pi/2 - 0$ до $-\pi/2 + 0$. Заметим, что справедливы соотношения

$$\lim_{\nu \rightarrow -\pi/2} E_{3(n-1)}(\nu) = \lim_{\nu \rightarrow \pi/2} E_{3n}(\nu) = \mathcal{E}_{3n}, \quad n \in \mathcal{N}_\zeta.$$

На рис. 4 приведены графики нижних энергетических уровней для $j = 1/2$ и $g = 0.5$ как функций параметра ν для $s = \pm 1$.

В заключение отметим, что так как с. с. граничные условия (34) инвариантны относительно замены $j \rightarrow -j$, $s \rightarrow -s$, то справедливо равенство $\hat{h}_{3\nu}(Z, j, s) = \hat{h}_{3\nu}(Z, -j, -s)$.

5.2.3. Сверхкритическая область

Сверхкритическая область изменения параметров (j, Z) в верхней полуплоскости определяется неравенством $Z > Z_c(j) = \alpha^{-1} \epsilon |j|$, которое эквивалентно тому, что $\Upsilon_+ = i\sigma$, где $\sigma = \sqrt{g^2 - j^2} > 0$. В этой области с. с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}_{4\nu}(Z, j, s)$ определяются следующими асимптотическими с. с. граничными условиями в начале координат:

$$\begin{aligned} F(\rho) = & c (ie^{i\nu}(m\rho)^{i\sigma} d_+ - \\ & - ie^{-i\nu}(m\rho)^{-i\sigma} d_-) + O(\rho^{1/2}), \\ d_\pm = & (1, (\kappa \pm i\sigma)/g)^T, \quad \rho \rightarrow 0, \\ \nu \in & [-\pi/2, \pi/2], \quad -\pi/2 \sim \pi/2. \end{aligned} \quad (39)$$

Область определения $D_{h_{4\nu}(Z, j, s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{4\nu}(Z, j, s)$ определяется выражением

$$D_{h_{4\nu}(Z, j, s)} = \{F(\rho) : F(\rho) \in D_{h(Z, j, s)}^*(\mathbb{R}_+) \text{ и } F \text{ удовлетворяет (39)}\}.$$

Базисная функция $\omega_{4\nu}(W)$ есть

$$\omega_{4\nu}(W) = -\frac{4i\sigma}{g} \frac{1 - \frac{g}{\Gamma(1-2i\sigma)}\omega(W)e^{2i\nu}}{1 + \frac{g}{\Gamma(1-2i\sigma)}\omega(W)e^{2i\nu}},$$

где функция $\omega(W)$ определена в (20). Базисный дублет $U_{4\nu}(W)$ имеет вид $U_{4\nu}(W) = ie^{i\nu}F_1(\rho; W) - ie^{-i\nu}F_2(\rho; W)$, где дублеты $F_1(\rho; W)$ и $F_2(\rho; W)$ даны в (19). Производная $\sigma'_{4\nu}(E)$ спектральной функции есть

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

Определяя носитель функции $\sigma'_{4\nu}(E)$ и вычисляя соответствующие величины, получим простой спектр гамильтониана $\hat{h}_{4\nu}(Z, j, s)$:

$$\begin{aligned} \operatorname{спес} \hat{h}_{4\nu}(Z, j, s) &= \\ &= \{E : |E| \geq m\} \cup \{E_{4n}(\nu) \in [-m, m]\}. \end{aligned}$$

Простой спектр состоит из непрерывного $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$ и точечного спектров. Точечный спектр представляет собой возрастающую бесконечную последовательность $\{E_{4n}(\nu) = E_{4n}(Z, j, s; \nu)\}$ энергетических уровней $E_{4n}(Z, j, s; \nu)$, которые определяются корнями уравнения

$$\begin{aligned} \omega_{4\nu}(E) = -\frac{4i\sigma}{g} \frac{1 - \frac{g}{\Gamma(1-2i\sigma)}\omega(E)e^{2i\nu}}{1 + \frac{g}{\Gamma(1-2i\sigma)}\omega(E)e^{2i\nu}} = 0, \\ E \in [-m, m). \end{aligned}$$

Последнее эквивалентно уравнению

$$1 - \frac{g\omega(E)e^{2i\nu}}{\Gamma(1-2i\sigma)} = 0, \quad E \in [-m, m), \quad (40)$$

которое будем называть спектральным уравнением.

Данные энергетические уровни содержатся в полуинтервале $[-m, m)$ и накапливаются в точке $E = m$. Бесконечные последовательности $\{n\}$ целых чисел n , обозначающих дискретные уровни энергии, мы определим ниже. Очевидно, что энергетические уровни с заданными Z, j явно зависят от s (т. е. от ζ), ввиду явной зависимости функции $\omega(E)$ от s .

Преобразуем спектральное уравнение (40) в другую форму, более удобную для дальнейшего анализа. Достаточно отметить, что

$$\begin{aligned} -\frac{g\omega(E)}{\Gamma(1-2i\sigma)} &= \\ &= \frac{\Gamma(2i\sigma)\Gamma(-i\sigma - g\frac{E}{\tau})[\tau(\kappa + i\sigma) - g(m-E)]}{\Gamma(-2i\sigma)\Gamma(i\sigma - g\frac{E}{\tau})[\tau(\kappa - i\sigma) - g(m-E)]} \times \\ &\quad \times \left(\frac{2\tau}{m}\right)^{-2i\sigma} = e^{-2i\Theta(E)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Theta(E) = \sigma \ln \frac{2\tau}{m} + \frac{1}{2i} \left\{ \ln \Gamma(-2i\sigma) - \ln \Gamma(2i\sigma) + \right. \\ \left. + \ln \Gamma\left(i\sigma - g\frac{E}{\tau}\right) - \ln \Gamma\left(-i\sigma - g\frac{E}{\tau}\right) + \right. \\ \left. + \ln[\tau(g_c - i\zeta\sigma) - \zeta g(m-E)] - \right. \\ \left. - \ln[\tau(g_c + i\zeta\sigma) - \zeta g(m-E)] \right\}, \end{aligned}$$

и уравнение (40) примет вид $\cos[\Theta(E) - \nu] = 0$. Заметим, что $\Theta(E)$ — гладкая функция на интервале $(-m, m)$.

Нормированные (обобщенные) собственные функции $U_{4\nu, E}(\rho)$, отвечающие непрерывному спектру, и нормированные собственные функции $U_{4\nu, n}(\rho)$, соответствующие дискретному спектру, формируют полную ортонормированную систему в пространстве $L^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения и имеют вид

$$\begin{aligned} U_{4\nu, E}(\rho) &= Q_{4\nu}(E)U_{4\nu}(\rho; E) = \\ &= Q_{4\nu}(E) (ie^{i\nu}F_1(\rho; E) - ie^{-i\nu}F_2(\rho; E)), \\ E &\in (-\infty, -m] \cup [m, \infty); \\ U_{4\nu, n}(\rho) &= Q_{4\nu, n}U_{4\nu}(\rho; E_{4n}(\nu)) = \\ &= Q_{4\nu, n} \left(ie^{i\nu}F_1(\rho; E_{4n}(\nu)) - \right. \\ &\quad \left. - ie^{-i\nu}F_2(\rho; E_{4n}(\nu)) \right), \end{aligned} \quad (41)$$

где

$$Q_{4\nu}(E) = \sqrt{\sigma'_{4\nu}(E)}, \quad Q_{4\nu, n} = \sqrt{-\frac{1}{\omega'_{4\nu}(E_{4n}(\nu))}}.$$

Теперь подробнее опишем свойства дискретного спектра.

Во-первых, для каждого значения параметров Z, j, s в сверхкритической области и для $\nu \neq \nu_{-m}$, см. (42), точечный спектр является чисто дискретным.

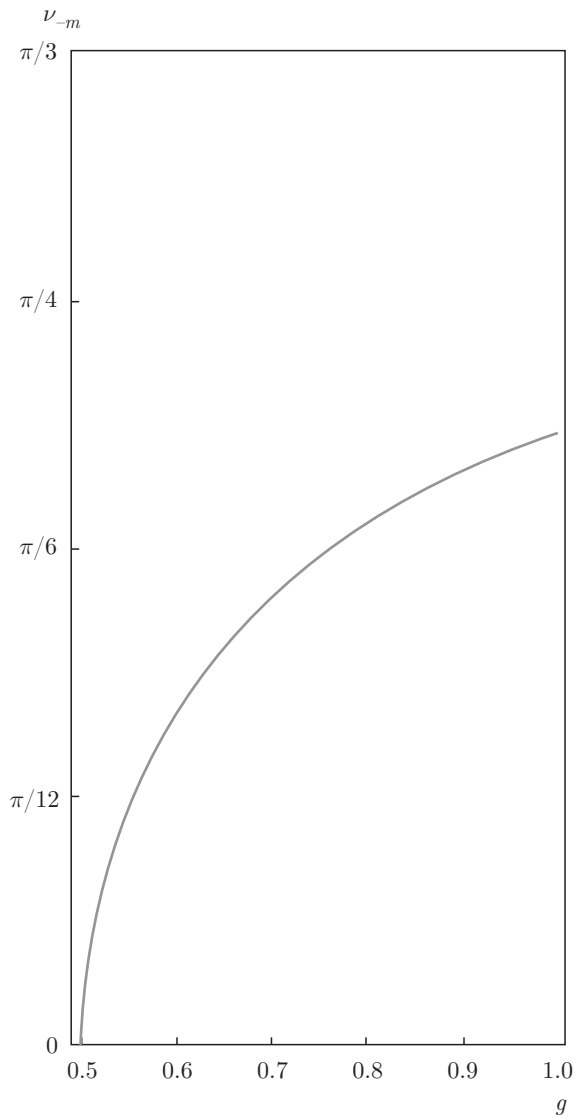


Рис. 5. Зависимость параметра ν_{-m} от g для $j = 1/2$

При $\nu = \nu_{-m}$ дискретный спектр дополняется энергетическим уровнем $E = -m$, который одновременно является верхней границей нижней ветви непрерывного спектра. Значения $\nu_{-m}(Z, j)$ определяются из уравнения (40) при $E = -m$. Так как

$$g\omega(-m) = \Gamma(1 + 2i\sigma)(2g)^{-2i\sigma},$$

то

$$e^{2i\nu_{-m}} = e^{-i\pi} (2g)^{2i\sigma} \frac{\Gamma(-2i\sigma)}{\Gamma(2i\sigma)}, \quad (42)$$

$$\nu_{-m} \in [-\pi/2, \pi/2], \quad -\pi/2 \sim \pi/2.$$

Отметим, что величина $\nu_{-m}(Z, j)$ не зависит от параметра s .

На рис. 5 приведен график изменения параметра ν_{-m} как функции параметра g для $j = 1/2$.

Во-вторых, в отличие от остальных областей, нумерация энергетических уровней в сверхкритической области не зависит от ζ .

В-третьих, для описания точечного спектра в этой области представляется удобным ввести двойную маркировку дискретных уровней энергии при $\nu = \pm\pi/2$. Мы формально различаем значения $\nu = -\pi/2$ и $\nu = \pi/2$, пометая энергетические уровни $\nu = -\pi/2$ целыми неотрицательными числами, $E_{4n}(-\pi/2)$, $n \in \mathbb{Z}_+ = \{0, 1, 2, 3, \dots\}$, в то время как уровни энергии с $\nu = \pi/2$ нумеруются натуральными числами, $E_{4n}(\pi/2)$, $n \in \mathbb{N}_+ = \{1, 2, 3, \dots\}$. Данное различие можно устранить, полагая $E_{4n}(-\pi/2) = E_{4(n+1)}(\pi/2)$, $n \in \mathbb{Z}_+$.

Относительно данной нумерации уровней, точечный спектр гамильтонианов $\hat{h}_{4\nu}(Z, j, s)$ выглядит следующим образом. В интервале $[-m, E_{40}(-\pi/2) = E_{41}(\pi/2))$ нет энергетических уровней для значений $\nu \in (\nu_{-m}, \pi/2)$. При этом для любого $\nu \in (-\pi/2, \nu_{-m}]$ существует один энергетический уровень $E_{40}(\nu)$, который монотонно возрастает от $-m$ до $E_{40}(-\pi/2) - 0$, когда ν меняется от ν_{-m} до $-\pi/2 + 0$. В каждом интервале энергий $[E_{4n}(\pi/2), E_{4(n+1)}(\pi/2) = E_{4n}(-\pi/2))$, $n \in \mathbb{N}_+$, существует один уровень $E_{4n}(\nu)$, который монотонно возрастает от $E_{4n}(\pi/2)$ до $E_{4n}(-\pi/2) - 0$, когда параметр ν меняется от $\pi/2$ до $-\pi/2 + 0$. В частности, мы имеем $-m \leq E_{40}(-\pi/2) < E_{4n}(-\pi/2) < E_{4(n+1)}(-\pi/2) < m \forall n \in \mathbb{Z}_+$.

На рис. 6 приведены графики нижних энергетических уровней как функций ν для $s = \pm 1$ при $j = 1/2$ и $g = 0.7$.

В заключение отметим, что выполняется равенство

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

так как с. с. граничные условия (39) не меняются при замене $j \rightarrow -j$, $s \rightarrow -s$.

6. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ ПОЛНЫЕ ГАМИЛЬТониАНЫ И ИХ СПЕКТР В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ ТОЧЕЧНОГО ЗАРЯДА

В разд. 5.1 и 5.2 мы построили все с. с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}_\epsilon(Z, j, s)$ для всех значений заряда Z как с. с. расширения исходных симметрических операторов $\hat{h}_{in}(Z, j, s)$ для любых значений j и s , а также исследовали спектральную задачу для всех таких гамильтонианов. В результа-

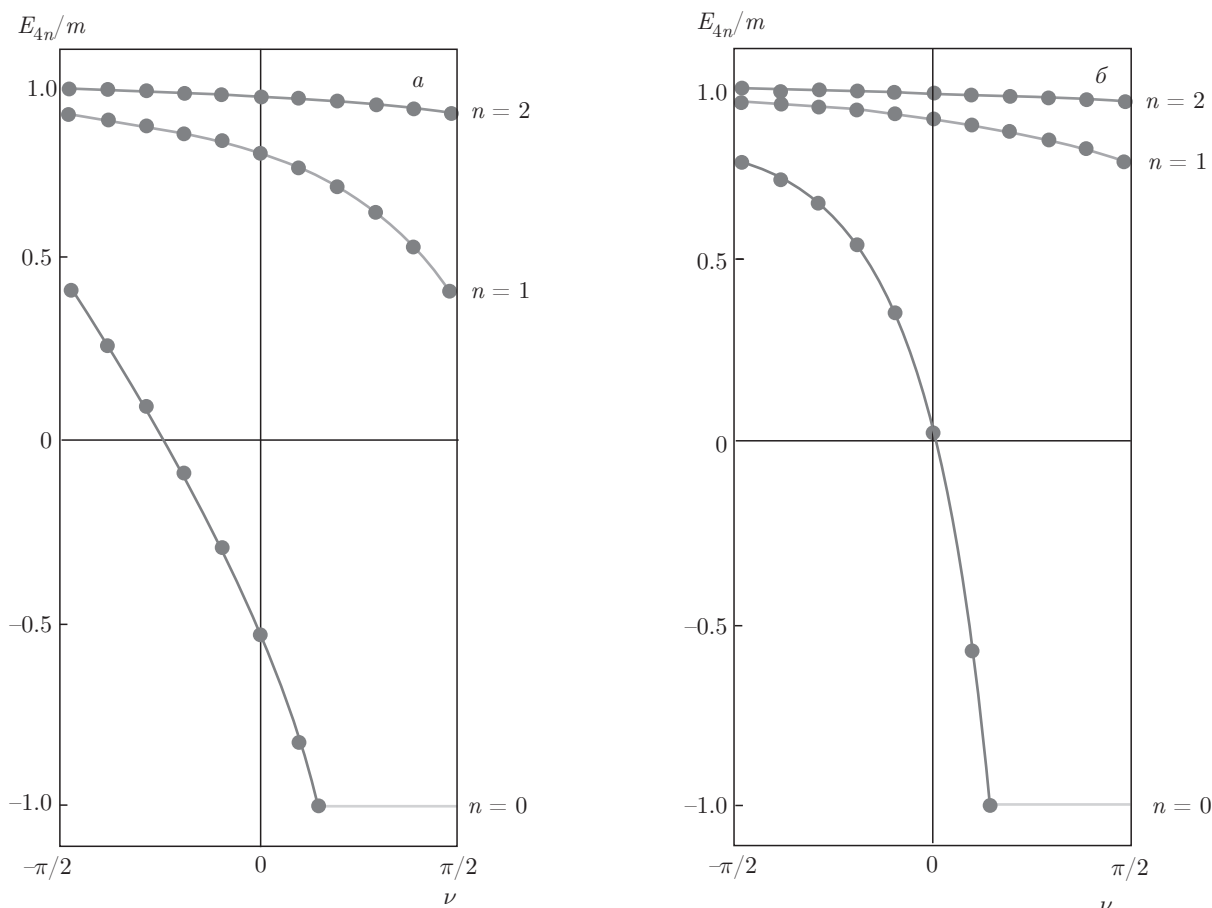


Рис. 6. Зависимости энергетических уровней E_{4n} от параметра ν для $s = 1$ (а), -1 (б)

те, формула (10) позволяет нам восстановить все с. операторы \hat{H}_s^c , ассоциированные с дифференциальным выражением (4) для любого значения параметра g , а также описать решение соответствующих спектральных задач для всех гамильтонианов \hat{H}_s^c .

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

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

и удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$g_c(k) < g_s(k + 1) < g_c(k + 1) < g_s(k + 2). \quad (43)$$

Введем интервалы $\Delta(k)$ следующим образом:

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

Ввиду (43), каждый интервал $\Delta(k)$ можно представить как $\Delta(k) = \cup_{i=1,2,3} \Delta_i(k)$, где

$$\begin{aligned} \Delta_1(k) &= (g_c(k), g_s(k + 1)], \\ \Delta_2(k) &= (g_s(k + 1), g_c(k + 1)), \\ \Delta_3(k) &= \{g_c(k + 1)\}. \end{aligned}$$

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

А. Пусть $g \implies (k, 1)$, так что $g \in \Delta_1(k)$ для некоторых k , откуда следует, что

$$k = g_c(k) < g \leq g_s(k+1) = \sqrt{(k+1)^2 - \frac{1}{4}}.$$

Рассмотрим квантовые числа $|j| \leq k$. В этом случае $g > g_c(k) \geq g_c(j)$, следовательно, $g > g_c(j)$. Такие квантовые числа j характеризуют сверхкритическую область, см. разд. 5.2.3.

Для квантовых чисел $|j| \geq k+1$ будем иметь $g \leq g_s(k+1) \leq g_s(j)$. Тогда квантовые числа j отвечают несингулярной области, см. разд. 5.1.

Таким образом, для данных значений g имеем

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{1E}(\rho), & |j| \geq k+1, \end{cases} & |E| \geq m, \\ U_n(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,n}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{1n}(\rho), & |j| \geq k+1, \end{cases} \\ E_n &= \begin{cases} E_{4n}(\nu), & |j| \leq k, \\ E_{1n}(Z, j, s), & |j| \geq k+1. \end{cases} \end{aligned} \quad (44)$$

В. Пусть $g \implies (k, 2)$, так что $g \in \Delta_2(k)$ для тех k , которые удовлетворяют неравенствам

$$\sqrt{(k+1)^2 - \frac{1}{4}} = g_s(k+1) < g < g_c(k+1) = k+1.$$

Рассмотрим квантовые числа $|j| \leq k$. Тогда $g > g_s(k+1) > g_c(k) \geq g_c(j)$, откуда $g > g_c(j)$. Данные квантовые числа j отвечают сверхкритической области, см. разд. 5.2.3.

Рассмотрим случай, когда $|j| = k+1$. Тогда $g_s(j) < g < g_c(j)$. Такие квантовые числа j отвечают субкритической области, см. разд. 5.2.1.

Рассмотрим случай $|j| > k+1$. Тогда $g < g_c(k+1) < g_s(k+2) \leq g_s(j)$, т.е. $g < g_s(j)$. Данные квантовые числа j отвечают несингулярной области, см. разд. 5.1.

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{2\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & |E| \geq m, \\ U_n(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,n}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{2\nu,n}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1n}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} \\ E_n &= \begin{cases} E_{4n}(\nu), & |j| \leq k, \\ E_{2n}(\nu), & |j| = k+1, \\ E_{1n}(Z, j, s), & |j| > k+1. \end{cases} \end{aligned} \quad (45)$$

С. Пусть $g \implies (k, 3)$, т.е. $g \in \Delta_3(k)$ для тех k , которые удовлетворяют уравнению $g = g_c(k+1) = k+1$.

Рассмотрим квантовые числа $|j| \leq k$. Тогда $g = g_c(k+1) > g_c(k) \geq g_c(j)$, откуда $g > g_c(j)$. Данные квантовые числа j отвечают сверхкритической области, см. разд. 5.2.3.

Рассмотрим квантовые числа $|j| = k+1$. Тогда $g = g_c(j)$. Данные квантовые числа j отвечают критической области, см. разд. 5.2.2.

Рассмотрим случай $|j| > k+1$. Тогда $g = g_c(k+1) < g_s(k+2) \leq g_s(j)$, откуда $g < g_s(j)$. Данные квантовые числа j отвечают несингулярной области, см. разд. 5.1.

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,E}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{3\nu,E}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} & |E| \geq m, \\ U_n(\rho) &= \begin{cases} U_{4\nu,n}(\rho), & |j| \leq k, \\ U_{3\nu,n}(\rho), & |j| = k+1, \\ U_{1n}(\rho), & |j| > k+1, \end{cases} \\ E_n &= \begin{cases} E_{4n}(\nu), & |j| \leq k, \\ E_{3n}(\nu), & |j| = k+1, \\ E_{1n}(Z, j, s), & |j| > k+1. \end{cases} \end{aligned} \quad (46)$$

Д. Пусть $g \in \Delta(0)$, т.е. $g < g_c(\pm 1/2)$. Рассмотрим квантовые числа $|j| > 1/2$. Тогда

$$g < g_c\left(\pm \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} < \sqrt{j^2 - \frac{1}{4}} = g_s(j).$$

Данные квантовые числа j отвечают несингулярной области, см. разд. 5.1.

Рассмотрим также случай $|j| = 1/2$. Тогда $0 = g_s(j) < g < g_c(j) = 1/2$. Данные квантовые числа j отвечают субкритической области, см. разд. 5.2.1.

Таким образом, имеем

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{2\nu,E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & |E| \geq m, \\ U_n(\rho) &= \begin{cases} U_{2\nu,n}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1\nu,n}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} \\ E_n &= \begin{cases} E_{2n}(\nu), & |j| = 1/2, \\ E_{1n}(\nu), & |j| > 1/2. \end{cases} \end{aligned} \quad (47)$$

Е. Осталось рассмотреть случай $g = g_c(\pm 1/2)$. Рассмотрим квантовые числа $|j| > 1/2$. Тогда

$$g = g_c\left(\pm \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{2} < \sqrt{j^2 - \frac{1}{4}} = g_s(j).$$

Данные квантовые числа j отвечают несингулярной области, см. разд. 5.1.

Рассмотрим случай $|j| = 1/2$. Тогда $g = g_c(j)$. Данные квантовые числа j отвечают критической области, см. разд. 5.2.2.

Следовательно, имеем

$$\begin{aligned} U_E(\rho) &= \begin{cases} U_{3\nu, E}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1E}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & |E| \geq m, \\ U_n(\rho) &= \begin{cases} U_{3\nu, n}(\rho), & |j| = 1/2, \\ U_{1\nu, n}(\rho), & |j| > 1/2, \end{cases} & (48) \\ E_n &= \begin{cases} E_{3n}(\nu), & |j| = 1/2, \\ E_{1n}(\nu), & |j| > 1/2. \end{cases} \end{aligned}$$

Теперь мы можем описать спектральную проблему для всех с. с. дираковских гамильтонианов для любых значений g . Отметим, что из неравенства $g > g_s(\pm 1/2) = 0$ и формулы (10) следует важный факт: полный с. с. дираковский гамильтониан \hat{H}_s не определен однозначно для любого заряда $Z = \epsilon g / \alpha_F$.

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

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

где собственные векторы имеют вид $\Psi_{sj}(\mathbf{r}) = V_{sj} U_E(\rho)$, см. (7).

Для любых констант связи g энергетический спектр любого с. с. дираковского гамильтониана \hat{H}_s^c содержит непрерывный спектр, занимающий как отрицательную, так и положительную полуоси $(-\infty, -m]$ и $[m, \infty)$, а также имеет дискретный спектр в интервале $(0, m)$ и включает в себя бесконечное число возрастающих уровней энергии, которые накапливаются в точке $E = m$. Как и в случае $3 + 1$ измерений (см. [13]), асимптотическая форма спектра при $n \rightarrow \infty$ задается известной нерелятивистской формулой:

$$E_n^{nonrel} = m - E_n = \frac{mg^2}{2n^2}.$$

Собственные функции $\Psi_{sjE}(\mathbf{r})$, $|E| \geq m$, которые соответствуют непрерывной части спектра, являются обобщенными собственными функциями оператора \hat{H}_s^c . А собственные функции $\Psi_{sjE_n}(\mathbf{r})$ оператора \hat{H}_s^c соответствуют связанным состояниям энергии E_n и принадлежат гильбертовому пространству \mathfrak{H} . Дублеты $U_E(\rho)$, которые соответствуют связанным со-

стояниям энергии E_n , обозначаются как $U_{E_n}(\rho) = U_n(\rho)$. Все дублеты $U_E(\rho)$ и $U_n(\rho)$, а также спектры E_n зависят от параметров расширения, от квантовых чисел j , параметра s и константы связи g согласно (44)–(48). Отметим, что параметры расширения зависят как от квантовых чисел j , так и от параметра s .

7. СПЕКТРАЛЬНАЯ ЗАДАЧА ДЛЯ РЕГУЛЯРИЗОВАННОГО КУЛОНОВСКОГО ПОЛЯ ПРИМЕСИ

В этом разделе мы рассмотрим связанные состояния и точечный спектр (для краткости в дальнейшем будем говорить о задаче точечного спектра) для квазичастиц в графене с примесью, генерирующей электрическое поле с регуляризованным кулоновским потенциалом $V(\rho)$ вида

$$V(\rho) = -g \begin{cases} 1/\rho_0, & \rho \leq \rho_0, \\ 1/\rho, & \rho \geq \rho_0. \end{cases} \quad (49)$$

Данный потенциал соответствует полю положительной заряженной примеси, равномерно распределенной по сферической поверхности радиуса обрезания ρ_0 (рис. 7). Параметр g определен в (2).

Предположим, что примесь находится в середине шестиугольника решетки графена. Регуляризация (49) представляет собой ситуацию, в которой параметр решетки a — самое близкое расстояние, на которое возможны переходы электронов между ячейками углерода в окрестности примеси [8]. Тогда предположим, что радиус обрезания имеет порядок постоянной решетки a . Для численных расчетов используем значение $\rho_0 = 0.6a$.

Дираковский гамильтониан \hat{H}_s^{reg} представляет собой дифференциальный оператор в гильбертовом

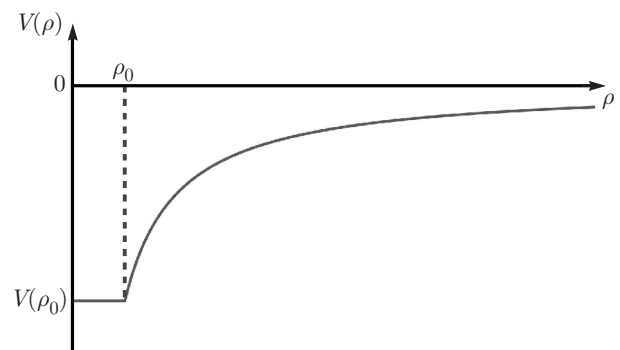


Рис. 7. Регуляризованный кулоновский потенциал

пространстве $\mathfrak{H} = \mathbb{L}^2(\mathbb{R}^2)$ (см. разд. 2), ассоциированный с дифференциальным выражением

$$\hat{H}_s^{reg} = -i(s\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y) + m\sigma_z + V(\rho)$$

и имеющий естественную область определения. Каждый гамильтониан $\hat{H}_s(Z)$ однозначно определен как с. с. оператор для всех значений Z , так как он представляет собой сумму однозначно определенного свободного дираковского гамильтониана (см. разд. 5.1) и ограниченного с. с. оператора умножения на ограниченную вещественную функцию $V(\rho)$.

Гамильтониан \hat{H}_s^{reg} является вращательно-инвариантным с точки зрения представления группы вращений U_s , и так же, как для кулоновского поля точечного заряда (см. разд. 3), спектральная задача для точечного спектра оператора \hat{H}_s^{reg} сводится к спектральной задаче точечного спектра для парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ с фиксированным значением момента $j = \pm 1/2, 3/2, \dots$. Каждый парциальный радиальный гамильтониан $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ для фиксированных значений параметров Z, j и s является с. с. оператором в гильбертовом пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+) = L^2(\mathbb{R}_+) \oplus L^2(\mathbb{R}_+)$ дублетов $F(\rho) = (f(\rho), g(\rho))^T$ (функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ будем называть радиальными функциями) и ассоциируется с парциальным радиальным дифференциальным выражением

$$\check{h}_{reg}(Z, j, s) = -i\sigma_y \frac{d}{d\rho} + \frac{\kappa}{\rho}\sigma_x + V(\rho) + m\sigma_z.$$

Данный оператор определяется на естественной области определения для \check{h} : область определения D_h для каждого оператора \check{h} состоит из множества абсолютно непрерывных дублетов $F(\rho)$ на $(0, \infty)$, обращающихся в нуль в начале координат, $f(0) = g(0) = 0$, и квадратично интегрируемых вместе с $\check{h}F(\rho)$ на $(0, \infty)$.

Поскольку потенциал $V(\rho)$ убывает на бесконечности, спектр каждого парциального радиального гамильтониана $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ состоит из непрерывной части спектра $(-\infty, -m] \cup [m, \infty)$ и точечного спектра $\{E_n(Z, j, s), n \in \mathbb{Z}_+\}$, расположенного на отрезке $[-m, m]$. Полный точечный спектр р.спес $\hat{H}_s^{reg}(Z)$ дираковского гамильтониана $\hat{H}_s^{reg}(Z)$, являющийся предметом нашего основного интереса, представляет собой объединение точечных спектров парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$,

$$\text{p.спес } \hat{H}_s^{reg}(Z) = \cup_j \text{p.спес } \hat{h}_{reg}(Z, j, s).$$

Соответствующие собственные функции $\Psi_{sj}(\mathbf{r})$ оператора $\hat{H}_s(Z)$ в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}^2)$ получаются при помощи унитарного преобразования V_{sj} (см. (7)) собственных функций $F(\rho)$ оператора $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$.

Точечный спектр и соответствующие собственные функции парциального радиального гамильтониана $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ определяются как решения стационарного парциального радиального уравнения Шредингера:

$$\begin{aligned} \hat{h}_{reg}(Z, j, s)F(\rho) &= EF(\rho), \\ E &\in [-m, m], \quad F(\rho) \in D_{h(Z, j, s)}. \end{aligned}$$

Из данного уравнения, для фиксированных Z, j и s следует система дифференциальных радиальных уравнений для радиальных функций $f(\rho)$ и $g(\rho)$:

$$\begin{aligned} f'(\rho) + \frac{\kappa}{\rho}f(\rho) - k_+(\rho)g(\rho) &= 0, \\ g'(\rho) - \frac{\kappa}{\rho}g(\rho) + k_-(\rho)f(\rho) &= 0, \\ k_{\pm}(\rho) &= E - V(\rho) \pm m. \end{aligned} \tag{50}$$

Система радиальных уравнений (50) должна быть дополнена условием $-m \leq E \leq m$ и функции $f(\rho)$ и $g(\rho)$ должны быть абсолютно непрерывны по переменной ρ на $(0, \infty)$, удовлетворять нулевым граничным условиям в начале координат, $f(0) = g(0) = 0$, и быть квадратично интегрируемыми на $(0, \infty)$ (фактически на бесконечности).

При нахождении точечных спектров $\{E_n(Z, j, s)\}$ на отрезке $-m \leq E \leq m$ необходимо рассматривать открытый интервал $-m < E < m$ и его конечные точки $E = m$ и $E = -m$ отдельно по техническим причинам, которые станут ясны ниже. Начнем с области энергий $-m < E < m$.

8. ДИСКРЕТНЫЙ СПЕКТР НА ИНТЕРВАЛЕ $(-m, m)$

8.1. Решение радиальных уравнений в области $0 \leq \rho \leq \rho_0$

Во внутренней области $0 \leq \rho \leq \rho_0$, где мы полагаем $f(\rho) = f_{in}(\rho)$ и $g(\rho) = g_{in}(\rho)$, функции $k_{\pm}(\rho)$ в (50) и (49) постоянны,

$$\begin{aligned} k_+(\rho) &= k_+ = E + \frac{g}{\rho_0} + m, \\ k_-(\rho) &= k_- = E + \frac{g}{\rho_0} - m, \quad E \in (-m, m). \end{aligned}$$

В этой области первое уравнение в (50) можно переписать в виде

$$g_{in}(\rho) = \frac{1}{k_+} \left[f'_{in}(\rho) + \frac{\kappa}{\rho} f_{in}(\rho) \right].$$

Тогда второе уравнение в (50) дает дифференциальное уравнение второго порядка для функции $f_{in}(\rho)$,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f_{in}(\rho)}{d\rho^2} + \left(\eta^2 - \frac{\nu^2 - 1/4}{\rho^2} \right) f_{in}(\rho) &= 0, \quad \nu \in \mathbb{Z}_+, \\ \eta &= \sqrt{k_+ k_-}, \quad k_+ k_- = \left(E + \frac{g}{\rho_0} \right)^2 - m^2, \\ \nu &= \left| \kappa + \frac{1}{2} \right| = |j| + \frac{\zeta}{2} = \begin{cases} |j| + 1/2, & \zeta = 1, \\ |j| - 1/2, & \zeta = -1. \end{cases} \end{aligned} \quad (51)$$

Уравнение (51) дополняется двумя граничными условиями в начале координат:

$$f_{in}(0) = 0, \quad \left[f'_{in}(\rho) + \frac{\kappa}{\rho} f_{in}(\rho) \right] \Big|_{\rho=0} = 0,$$

где последнее условие является следствием требования $g_{in}(0) = 0$ и нетривиально только в случае $\nu = 0$. Для $\nu \neq 0$ второе условие является следствием первого.

Общее решение уравнения (51), удовлетворяющее данным граничным условиям, имеет вид (см. [22]):

$$\begin{aligned} f_{in}(\rho) &= c\sqrt{\rho} J_\nu(\eta\rho) = \\ &= c\sqrt{\rho} \begin{cases} J_{|j|+1/2}(\eta\rho), & \zeta = 1, \\ J_{|j|-1/2}(\eta\rho), & \zeta = -1, \end{cases} \quad c \in \mathbb{C}. \end{aligned} \quad (52)$$

Используя соотношение $J'_\nu(z) \mp (\nu/z) J_\nu(z) = \mp J_{\nu \pm 1}(z)$, см. [23], получим

$$\begin{aligned} g_{in}(\rho) &= c\sqrt{\rho} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta\rho) = \\ &= c\sqrt{\rho} \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \begin{cases} J_{|j|-1/2}(\eta\rho), & \zeta = 1, \\ -J_{|j|+1/2}(\eta\rho), & \zeta = -1. \end{cases} \end{aligned} \quad (53)$$

8.2. Решение радиальных уравнений в области $\rho_0 \leq \rho < \infty$

Во внешней области $\rho \in [\rho_0, \infty)$, где мы полагаем $f(\rho) = f_{out}(\rho)$, $g(\rho) = g_{out}(\rho)$, система уравнений (50), (49) по форме идентична системе уравнений в трехмерной кулоновской задаче с точечным зарядом, см. [13, 16]. Единственное отличие состоит в том, что параметр $g = \alpha_F Z / \epsilon$ заменяется на αZ ,

где α — постоянная тонкой структуры, а параметр $\kappa = -sj$, $s = \pm 1$, $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$, заменяется на $\varkappa = \zeta(j + 1/2)$, $\zeta = \pm 1$, $j = 1/2, 3/2, \dots$. Общее решение последней системы хорошо известно. В нашем случае система уравнений (50) и (49) дополняется условием, что функции $f_{out}(\rho)$ и $g_{out}(\rho)$ должны быть квадратично интегрируемыми на бесконечности. Тогда решение системы определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} f_{out}(\rho) &= B \sqrt{\frac{2m}{m-E}} (2\beta\rho)^\mu e^{-\beta\rho} \times \\ &\times \left[b_- \Psi(a+1, c; 2\beta\rho) + \Psi(a, c; 2\beta\rho) \right], \\ g_{out}(\rho) &= B \sqrt{\frac{2m}{m+E}} (2\beta\rho)^\mu e^{-\beta\rho} \times \\ &\times \left[b_- \Psi(a+1, c; 2\beta\rho) - \Psi(a, c; 2\beta\rho) \right], \end{aligned} \quad (54)$$

где

$$\begin{aligned} \beta &= \sqrt{m^2 - E^2}, \quad \mu = \sqrt{\kappa^2 - g^2}, \\ a &= \mu - \frac{gE}{\beta}, \quad c = 1 + 2\mu, \quad b_- = \kappa + \frac{gm}{\beta}, \end{aligned} \quad (55)$$

Ψ — стандартная конфлюэнтная гипергеометрическая функция, убывающая на бесконечности, см. (15).

В дальнейшем будем использовать функции Уиттекера, см. [23],

$$W_{\lambda, \mu}(x) = e^{-x/2} x^{c/2} \Psi(a, c; x), \quad \lambda = \frac{c}{2} - a, \quad \mu = \frac{c-1}{2},$$

где новая переменная ε определяется как $E = m \cos \varepsilon$, $\varepsilon = \arccos(E/m) \in (0, \pi)$. Окончательная форма решений системы уравнений (50) и (49) во внешней области $\rho_0 \leq \rho < \infty$ имеет вид

$$\begin{aligned} f_{out}(\rho) &= B \operatorname{cosec} \left(\frac{\varepsilon}{2} \right) (2\beta\rho)^{-1/2} \times \\ &\times \left[(g \operatorname{cosec} \varepsilon + \kappa) W_{\lambda', \mu}(2\beta\rho) + W_{\lambda, \mu}(2\beta\rho) \right], \\ g_{out}(\rho) &= B \sec \left(\frac{\varepsilon}{2} \right) (2\beta\rho)^{-1/2} \times \\ &\times \left[(g \operatorname{cosec} \varepsilon + \kappa) W_{\lambda', \mu}(2\beta\rho) - W_{\lambda, \mu}(2\beta\rho) \right], \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \beta &= m \sin \varepsilon, \quad \lambda = \frac{gE}{\beta} + \frac{1}{2} = g \operatorname{ctg} \varepsilon + \frac{1}{2}, \\ \lambda' &= \lambda - 1 = g \operatorname{ctg} \varepsilon - \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

8.3. Численные решения для дискретного спектра в области $(-m, m)$

После того как мы нашли общее решение уравнений (50) в соответствующих областях $0 \leq \rho \leq \rho_0$ и $\rho_0 \leq \rho < \infty$, осталось учесть условие непрерывности решения в целом (т. е. сшить полученные решения), что сводится к требованию непрерывности решения в точке $\rho = \rho_0$:

$$f_{in}(\rho_0) = f_{out}(\rho_0), \quad g_{in}(\rho_0) = g_{out}(\rho_0). \quad (56)$$

Если константы c и B не равны нулю, условие совместности этих условий приводит к трансцендентному уравнению, которое определяет дискретный энергетический спектр в области $(-m, m)$ в терминах переменной ε ,

$$J_\nu(\eta\rho_0) \operatorname{sech}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) [(\kappa + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) - W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)] - \sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta\rho_0) \operatorname{cosec}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \times \\ \times [(\kappa + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) + W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)] = 0, \quad (57)$$

где $k_\pm = m(\cos \varepsilon \pm 1) + g/\rho_0$. Это базовое уравнение будем называть спектральным уравнением для интервала $(-m, m)$. Строго говоря, мы имеем дело с серией точных спектральных уравнений для заданных значений Z, j и s .

После решения спектрального уравнения, т. е. нахождения собственных значений $E_n(Z, j, s)$ парциальных радиальных гамильтонианов $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$, соответствующие собственные функции $F_n(Z, j, s) \in \mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ связанных состояний гамильтонианов $\hat{h}_{reg}(Z, j, s)$ получаются путем подстановки вычисленных собственных значений энергии $E = E_n(Z, j, s)$ в формулы (52)–(54) с учетом условия шивки (56). Так что остается неопределенность только в нормировке волновых функций (дублетов). Аналитическое решение спектрального уравнения (57) для всех значений параметров Z, j и s выходит за рамки наших возможностей. В настоящее время мы представляем только численное решение спектрального уравнения.

Эквивалентная форма спектрального уравнения (57) с некоторой фиксированной величиной ζ , которая, возможно, более подходит для численных расчетов, имеет вид

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \frac{J_{|j|-1/2}(\eta\rho_0)}{J_{|j|+1/2}(\eta\rho_0)} - \operatorname{tg}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \times \\ \times \frac{[(|j| + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) - W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)]}{[(|j| + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) + W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)]} = 0$$

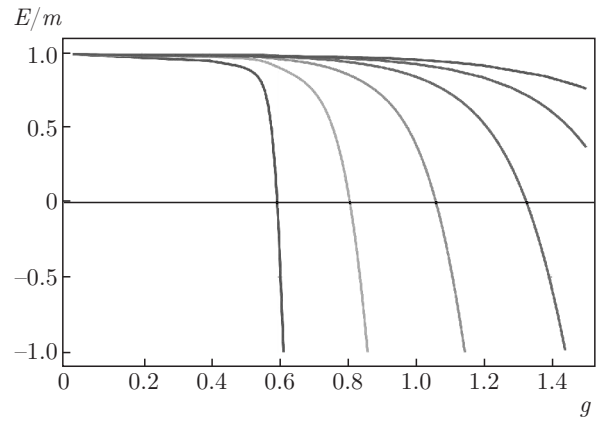


Рис. 8. Зависимости нижних энергетических уровней от параметра g для $j = 1/2$ и $s = 1$

для $\zeta = 1$ и

$$\sqrt{\frac{k_-}{k_+}} \frac{J_{|j|+1/2}(\eta\rho_0)}{J_{|j|-1/2}(\eta\rho_0)} + \operatorname{tg}\left(\frac{\varepsilon}{2}\right) \times \\ \times \frac{[(-|j| + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) - W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)]}{[(-|j| + g \operatorname{cosec} \varepsilon)W_{\lambda',\mu}(2\beta\rho_0) + W_{\lambda,\mu}(2\beta\rho_0)]} = 0$$

для $\zeta = -1$.

Результаты численных расчетов для частного случая $j = 1/2, s = 1$, который соответствует самым нижним энергетическим уровням, показаны на рис. 8.

9. СОБСТВЕННЫЕ СОСТОЯНИЯ ДЛЯ $E = \pm m$

Полученные выше результаты требуют уточнения в точках $E = m$ и $E = -m$, потому что согласно уравнениям (54) и (55) в этих точках переменная $\beta = \sqrt{m^2 - E^2}$ обращается в нуль, тогда как коэффициенты $1/\sqrt{m-E}, 1/\sqrt{m+E}, b_- = \kappa + gm/\beta$ и параметр $a = \mu - gE/\beta$ расходятся. Поэтому эти точки необходимо рассмотреть отдельно.

9.1. Точка $E = m$

Достаточно исследовать соотношения (50) и (49) при $E = m$ во внешней области $\rho_0 \leq \rho < \infty$, где они имеют вид

$$f'(\rho) + \frac{\kappa}{\rho} f(\rho) - \left(2m + \frac{g}{\rho}\right) g(\rho) = 0, \quad (58) \\ g'(\rho) - \frac{\kappa}{\rho} g(\rho) + \frac{g}{\rho} f(\rho) = 0.$$

Данную систему уравнений необходимо рассматривать в классе абсолютно непрерывных функций $f(\rho)$

и $g(\rho)$, которые являются квадратично интегрируемыми вместе с их производными на (ρ_0, ∞) .

Из второго уравнения (58) находим, что функция $g(\rho)$ удовлетворяет дифференциальному уравнению второго порядка

$$g''(\rho) + \frac{1}{\rho}g'(\rho) + \left(\frac{2gm}{\rho} - \frac{\kappa^2 - g^2}{\rho^2} \right) g(\rho) = 0. \quad (59)$$

При помощи замены $g(\rho) = w(z)$, $z = 2\sqrt{2gm\rho}$ уравнение (59) приводится к уравнению Бесселя,

$$w''(z) + \frac{1}{z}w'(z) + \left(1 - \frac{\tilde{\nu}^2}{z^2} \right) w(z) = 0,$$

с $\tilde{\nu} = 2\mu = 2\sqrt{j^2 - g^2}$, $2\sqrt{2gm\rho_0} \leq z < \infty$. Общее решение данного уравнения есть $w(z) = c_1 H_{\tilde{\nu}}^{(1)}(z) + c_2 H_{\tilde{\nu}}^{(2)}(z)$, где $H_{\tilde{\nu}}^{(1)}(z)$ и $H_{\tilde{\nu}}^{(2)}(z)$ — функции Ханкеля первого и второго рода соответственно, см. [23]. Асимптотическое поведение общего решения на бесконечности ($z \rightarrow \infty$) определяется соотношением

$$w(z) = c_1 \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left[\frac{i}{4} (4z - 2\pi\tilde{\nu} - \pi) \right] \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right] + c_2 \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \exp \left[-\frac{i}{4} (4z - 2\pi\tilde{\nu} - \pi) \right] \left[1 + O\left(\frac{1}{z}\right) \right].$$

Из второго уравнения (58) следует, что асимптотическое поведение обеих функций $f(\rho)$ и $g(\rho)$ на бесконечности оценивается как $f(\rho) = O(\rho^{-1/4})$, $g(\rho) = O(\rho^{-1/4})$, $\rho \rightarrow \infty$, так что обе функции не являются квадратично интегрируемыми на бесконечности. Это означает, что система уравнений (58) не имеет квадратично интегрируемых решений и, следовательно, не существует связанных состояний с энергией $E = m$, т.е. с нулевой энергией связи. То же справедливо и для фермиона как в регуляризованном кулоновском поле произвольного заряда Z с обрезанием (49), так и в кулоновском поле точечного заряда.

9.2. Точка $E = -m$

Система радиальных уравнений (50) для связанных состояний с $E = -m$, т.е. с энергией связи $2m$, имеет вид

$$\begin{aligned} f'(\rho) + \frac{\kappa}{\rho}f(\rho) + V(\rho)g(\rho) &= 0, \\ g'(\rho) - \frac{\kappa}{\rho}g(\rho) - [V(\rho) + 2m]f(\rho) &= 0. \end{aligned} \quad (60)$$

При этом требуется абсолютная непрерывность функций $f(\rho)$ и $g(\rho)$ вместе с их первыми производными, квадратичная интегрируемость на $(0, \infty)$ и обращение данных функций в нуль в начале координат, $f(0) = 0$, $g(0) = 0$.

9.2.1. Решения в области $0 \leq \rho \leq \rho_0$

Общее решение системы (60) и (49) во внутренней области $0 \leq \rho \leq \rho_0$, где мы полагаем $f(\rho) = f_{in}(\rho)$ и $g(\rho) = g_{in}(\rho)$, при указанных выше условиях имеет вид

$$\begin{aligned} f_{in}(\rho) &= c\sqrt{\rho}J_{\nu}(\eta_0\rho) = c\sqrt{\rho} \begin{cases} J_{|j|+1/2}(\eta_0\rho), & \zeta = 1, \\ J_{|j|-1/2}(\eta_0\rho), & \zeta = -1, \end{cases} \\ g_{in}(\rho) &= c\sqrt{\rho}\sqrt{1 - \frac{2m\rho_0}{g}} \zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0\rho) = \\ &= c\sqrt{\rho}\sqrt{1 - \frac{2m\rho_0}{g}} \begin{cases} J_{|j|-1/2}(\eta_0\rho), & \zeta = 1, \\ -J_{|j|+1/2}(\eta_0\rho), & \zeta = -1, \end{cases} \end{aligned}$$

где $\eta_0 = (g/\rho_0)\sqrt{1 - 2m\rho_0/g}$. Достаточно положить $E = -m$ в (51)–(53).

9.2.2. Решения в области $\rho_0 \leq \rho < \infty$

Во внешней области $\rho_0 \leq \rho < \infty$ мы полагаем $f(\rho) = f_{out}(\rho)$, $g(\rho) = g_{out}(\rho)$, и уравнения (60) и (49) принимают вид

$$\begin{aligned} f'_{out}(\rho) + \frac{\kappa}{\rho}f_{out}(\rho) - \frac{g}{\rho}g_{out}(\rho) &= 0, \\ g'_{out}(\rho) - \frac{\kappa}{\rho}g_{out}(\rho) - \left(2m - \frac{g}{\rho} \right) f_{out}(\rho) &= 0. \end{aligned} \quad (61)$$

Мы накладываем на функции $f_{out}(\rho)$ и $g_{out}(\rho)$ условие абсолютной непрерывности и квадратичной интегрируемости вместе с их производными на интервале (ρ_0, ∞) .

С учетом уравнения (61) получим

$$\begin{aligned} f''_{out}(\rho) + \frac{1}{\rho}f'_{out}(\rho) - \\ - \frac{2gm}{\rho}f_{out}(\rho) - \frac{\kappa^2 - g^2}{\rho^2}f_{out}(\rho) &= 0. \end{aligned} \quad (62)$$

Подстановка $f_{out}(\rho) = w(z)$, $z = 2\sqrt{2gm\rho}$ приводит (62) к модифицированному уравнению Бесселя, см. [23],

$$\begin{aligned} w''(z) + \frac{1}{z}w'(z) - \left(1 + \frac{\tilde{\nu}^2}{z^2} \right) w(z) &= 0, \\ \tilde{\nu} = 2\mu = 2\sqrt{j^2 - g^2}, \quad 2\sqrt{2gm\rho_0} \leq z < \infty. \end{aligned}$$

Из требования квадратичной интегрируемости функции $f_{out}(\rho)$ на бесконечности получаем $f_{out}(\rho) = AK_{\tilde{\nu}}(z)$, где $K_{\tilde{\nu}}(z)$ — функция Макдональда,

$$\begin{aligned} K_{\tilde{\nu}}(z) &= \frac{\pi}{2 \sin \pi \tilde{\nu}} [I_{-\tilde{\nu}}(z) - I_{\tilde{\nu}}(z)], \quad \tilde{\nu} \neq n \in \mathbb{Z}_+, \\ I_{\tilde{\nu}}(z) &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(z/2)^{2m+\tilde{\nu}}}{m! \Gamma(m + \tilde{\nu} + 1)}, \quad K_{\tilde{\nu}}(z) = K_{-\tilde{\nu}}(z). \end{aligned}$$

Для $\tilde{\nu} = n \in \mathbb{Z}_+$ функции $K_n(z)$ содержат члены с логарифмическим множителем, см. [23].

Таким образом, мы получили общее решение уравнений (61):

$$f_{out}(\rho) = AK_{\tilde{\nu}}(z), \quad z = 2\sqrt{2gm\rho},$$

$$g_{out}(\rho) = \frac{A}{g} \left[\frac{z}{2} \frac{d}{dz} K_{\tilde{\nu}}(z) + \kappa K_{\tilde{\nu}}(z) \right] =$$

$$= \frac{A}{g} \left\{ -\frac{z}{4} [K_{\tilde{\nu}-1}(z) + K_{\tilde{\nu}+1}(z)] + \kappa K_{\tilde{\nu}}(z) \right\},$$

где воспользовались известным соотношением $K_{\tilde{\nu}-1}(z) + K_{\tilde{\nu}+1}(z) = -2K'_{\tilde{\nu}}(z)$ (см. [23]).

10. СВЕРХКРИТИЧЕСКИЕ ЗАРЯДЫ

После того как общее решение системы (60) найдено в соответствующих областях $0 \leq \rho \leq \rho_0$ и $\rho_0 \leq \rho < \infty$, остается выполнить основное условие непрерывности решения в целом (другими словами, гладко сшить парциальные решения), которое сводится к требованию непрерывности решения в точке $\rho = \rho_0$,

$$f_{in}(\rho_0) = f_{out}(\rho_0), \quad g_{in}(\rho_0) = g_{out}(\rho_0). \quad (63)$$

Вместе с условиями $c \neq 0, A \neq 0$ равенство (63) дает уравнение

$$J_{\nu}(\eta_0\rho_0) \left\{ -\frac{z_0}{4} [K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)] + \kappa K_{\tilde{\nu}}(z_0) \right\} - (\eta_0\rho_0)\zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0\rho_0)K_{\tilde{\nu}}(z_0) = 0, \quad (64)$$

$$\eta_0\rho_0 = g\sqrt{1 - \frac{2m\rho_0}{g}}, \quad z_0 = 2\sqrt{2gm\rho_0},$$

которое можно рассматривать как уравнение для констант связи g , определяющее связанные состояния с энергией $E = -m$. Константы связи, удовлетворяющие данному уравнению, будем обозначать как $g^{(-m)}(j, s)$.

Найти аналитическое решение $g^{(-m)}(j, s)$ уравнения (64) для произвольных значений j и s в настоящее время вряд ли возможно. Мы можем только провести его качественный анализ и решать численно.

Эквивалентная форма уравнения (64), более подходящая для качественного анализа и численного решения, имеет вид

$$(\eta_0\rho_0) \frac{\zeta J_{\nu-\zeta}(\eta_0\rho_0)}{J_{\nu}(\eta_0\rho_0)} + \left[\frac{z_0}{4} \frac{K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)}{K_{\tilde{\nu}}(z_0)} - \kappa \right] = 0. \quad (65)$$

Существует бесконечная возрастающая последовательность $\{g_n^{(-m)}(j, s), n \in \mathbb{N}\}$, $g_n^{(-m)}(j, s) \rightarrow \infty$ при $n \rightarrow \infty$, корней данного уравнения для любых фиксированных значений параметров j и s , см. [16]. Данной бесконечной последовательности соответствует бесконечная возрастающая последовательность $\{Z_n^{(-m)}(j, s) = \alpha_F^{-1}\epsilon g_n^{(-m)}(j, s), n \in \mathbb{N}\}$ зарядов Z .

Мы определяем сверхкритический заряд $Z_{scr}(j, s)$ для каждой пары параметров j и s как целое число, ближайшее к $Z_1(j, s)$ (первое слагаемое в последовательности $\{Z_n^{(-m)}(j, s), n \in \mathbb{N}\}$) сверху:

$$Z_{scr}(j, s) = \begin{cases} [Z_1(j, s)] + 1, & Z_1(j, s) \notin \mathbb{N}, \\ Z_1(j, s), & Z_1(j, s) \in \mathbb{N}, \end{cases}$$

$$Z_1(j, s) = (\alpha_F^{-1}\epsilon)g_1^{(-m)}(j, s),$$

где скобки $[...]$ обозначают целую часть вещественного числа.

Мы считаем, что сверхкритический заряд определяется минимумом всех зарядов $Z_n^{(-m)}(j, s)$, который достигается, когда $j = 1/2$ и $s = 1$:

$$Z_{scr} = \begin{cases} [Z_1(1/2, 1)] + 1, & Z_1(1/2, 1) \notin \mathbb{N}, \\ Z_1(1/2, 1), & Z_1(1/2, 1) \in \mathbb{N}. \end{cases}$$

Соответствующую константу связи $g_{scr} = g_1^{(-m)} \times (1/2, 1)$ будем называть сверхкритической константой связи.

Стоит отметить, что сверхкритические заряды зависят от регуляризации кулоновского поля, т.е. сверхкритические заряды зависят от рассматриваемой модели. И кроме того, они зависят от параметров α_F и ϵ .

Для определения $g_n^{(-m)}(1/2, 1)$ удобно представить уравнение (65) в виде $\phi(g) = 0$,

$$\phi(g) = (\eta_0\rho_0) \frac{J_1(\eta_0\rho_0)}{J_0(\eta_0\rho_0)} - \left[\frac{z_0}{4} \frac{K_{\tilde{\nu}-1}(z_0) + K_{\tilde{\nu}+1}(z_0)}{K_{\tilde{\nu}}(z_0)} + \frac{1}{2} \right],$$

где $\tilde{\nu} = \sqrt{1 - 4g^2}$.

Результаты численных расчетов представлены на рис. 9. Приведем также первые несколько значений $g_n^{(-m)}(1/2, 1)$:

$$\{g_n^{(-m)}(1/2, 1)\} = \left\{ 0.54731, 0.767737, 1.05737, 1.35964, 1.65711, \dots \right\}, \quad (66)$$

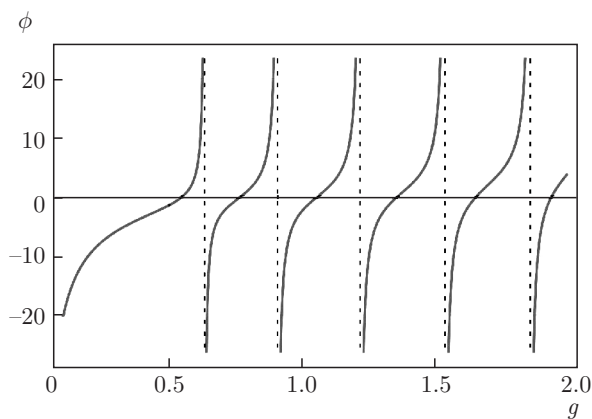


Рис. 9. Графическое решение уравнения (65)

для $m = 0.26$ эВ. Последовательность (66) соответствует последовательности $\{Z_n^{(-m)}(1/2, 1)\}$. Таким образом, мы получаем, что

$$g_{scr} = g_1^{(-m)}(1/2, 1) = 0.54731.$$

11. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате решения спектральных задач для электронных возбуждений в графене в присутствии точечных кулоновских примесей показано, что с математической точки зрения нет проблем в вычислении с. с. гамильтонианов, которые определяют энергетические спектры и соответствующие полные наборы собственных функций для любого заряда примеси. Построены семейства всех возможных с. с. гамильтонианов, которые параметризуются параметрами расширения. Общая теория описывает все возможности, которые математика предоставляет физике на выбор. При этом физическая интерпретация выбора с. с. расширений является чисто физической проблемой.

Вычислены уровни энергии и соответствующие (обобщенные)собственные функции для любого заряда примеси (см. (44)–(48)). Для несингулярной области ($g \leq g_s(j)$) энергетические уровни и нормированные (обобщенные) собственные функции были получены в (26) и (27), (28) соответственно. Для субкритической области ($g_s(j) < g < g_c(j)$) они получены в (30), (31), для критической области ($g = g_c(j)$) — в (36), (37), для сверхкритической области ($g > g_c(j)$) — в (40), (41).

Подчеркнем, что полученные собственные функции можно использовать для расчета локальной плотности состояний, которая может быть измерена

экспериментально с помощью метода сканирующей туннельной микроскопии [24]. Важность расчетов в графене с кулоновскими примесями подтверждается результатами работы [9], где было показано, что в отличие от недопированного графена имеются существенные различия в поведении локальной плотности состояний вблизи границы положительного континуума.

Интересно отметить, что в нашей задаче критическая константа связи $g_c(\pm 1/2) = 1/2$ и нижняя критическая константа связи $g_s(\pm 1/2) = 0$, тогда как в трехмерном случае они равны $g_c(1/2) = 1$, $g_s(1/2) = \sqrt{3}/2$. Кроме того, из-за большого значения постоянной тонкой структуры в графене, $\alpha_F \approx 2.2$, критическое значение заряда примеси мало: $Z_c = Z_c(\pm 1/2) \approx 1$, что открывает возможность проверки сверхкритической неустойчивости в графене [7]. Действительно, атомный коллапс в графене наблюдался экспериментально и описан в работе [25].

В отличие от трехмерного случая, в рассматриваемой задаче для всех значений заряда примеси соответствующие с. с. гамильтонианы не определены однозначно. Напомним, что дираковский гамильтониан для электрона в кулоновском поле в трех измерениях определяется однозначно для $Z \leq 118$. Отметим, что переход через критическое значение заряда не приводит к каким-либо качественным изменениям в математическом описании системы.

Следует отметить, что в работе [26] спектр связанных состояний низкоэнергетических возбуждений в допированном графене с заряженной примесью изучался без убедительного анализа асимптотического поведения волновых функций, основанного на правильном построении соответствующего с. с. дираковского гамильтониана. Кроме того, в работе [27] рассмотрены с. с. дираковские гамильтонианы с кулоновским полем в сочетании с полем Ааронова–Бома в $2 + 1$ и их спектральный анализ. Однако в этой работе не были приняты во внимание особенности данной задачи в графене. Из-за этого радикальные гамильтонианы, которые рассматривались в данной работе, параметризованы особым образом, что не позволяет отождествлять их с соответствующими гамильтонианами реальной задачи в графене. Более того, случай, когда дополнительное внешнее поле (поле Ааронова–Бома) равно нулю, который необходим для возможного сравнения, не был изучен и представляется нетривиальной задачей.

Исследуя спектральную задачу в графене в присутствии примеси с регуляризованным кулоновским потенциалом (см. разд. 7), мы нашли так называемые сверхкритические заряды, для которых самые

низкие уровни энергетических спектров достигают значения $-m$. Формально (см. обсуждение в [16], где изучался соответствующий трехмерный случай, и в [28, 29]) это может указывать на то, что для таких зарядов вакуум становится нестабильным относительно возможного создания пар. Также это может указывать на то, что задача становится многочастичной, и поэтому одночастичная релятивистская квантовая механика, основанная на гамильтониане Дирака, терпит неудачу. Тогда вычислений в рамках последней модели может быть недостаточно для утверждений о существовании реальных физических эффектов, таких как рождение частиц. Поэтому мы считаем, что проблема рождения электрон-позитронных пар из вакуума сверхкритическим кулоновским полем еще далека от своего решения. Вот почему мы не можем принять заключение работы [15] о том, что реальное рождение электрон-позитронных пар регуляризованным сверхкритическим кулоновским полем невозможно.

Заметим, что уравнение (65), которое определяет сверхкритическую константу связи g_{scr} , имеет решения только для $g_{scr} > g_c(\pm 1/2) = 0.5$. Для $\rho_0 = 0.6a$ и $m = 0.26$ эВ мы получили $g_{scr} = 0.54731$, что соответствует небольшим значениям заряда $Z_{scr} \simeq Z_c \simeq 1$ для диэлектрической проницаемости в диапазоне $\epsilon \approx 2.4-5$. Таким образом, даже после регуляризации сверхкритический заряд совпадает с критическим зарядом для случая кулоновского поля точечного заряда. Отметим, что в трехмерном случае для регуляризованного кулоновского потенциала сверхкритический заряд $Z_{scr} = 174$ больше соответствующего критического заряда $Z_c = 138$ [16].

Заметим, что в работах [10, 11] использовалась та же регуляризация для кулоновского поля примесей, и уравнение для спектра (с точностью до обозначений) в случае $s = 1$ имеет вид (57). Однако результаты численных расчетов относятся к другим физическим параметрам, чем в нашей работе. Кроме того, расчеты критического заряда проводились только в нулевом пределе параметра обрезания. Отметим, что изучение критических зарядов, аналогичное настоящей работе, было предпринято в работах [8, 9], где, однако, дискретный спектр не исследовался.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. G. W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).
2. J. S. Goldstein, Phys. Rev. **91**, 1516 (1953); P. I. Fomin, V. P. Gusynin, V. A. Miransky et al., Rivista Nuovo Cim. **6**, 5 (1983); N. Setö, Progr. Theor. Phys. Suppl. **95**, 25 (1988).
3. A. E. Shabad and V. V. Usov, Phys. Rev. Lett. **96**, 180401 (2006); Phys. Rev. D **73**, 125021 (2006).
4. S. P. Gavrilov, D. M. Gitman, and N. Yokomizo, Phys. Rev. D **86**, 125022 (2012).
5. N. Vandecasteele, A. Barreiro, M. Lazzeri et al., Phys. Rev. B **82**, 045416 (2010).
6. K. Nomura and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **98**, 076602 (2007).
7. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).
8. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. C. Neto, Phys. Rev. B **78**, 085101 (2008).
9. W. Zhu, Z. Wang, Q. Shi et al., Phys. Rev. B **79**, 155430 (2009).
10. E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, and O. O. Sobol, Low Temp. Phys. **44**, 371 (2018).
11. O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, and V. P. Gusynin, Phys. Rev. B **80**, 165429 (2009).
12. B. L. Voronov, D. M. Gitman, and I. V. Tyutin, Theor. Math. Phys. **150**, 34 (2007).
13. D. M. Gitman, I. V. Tyutin, and B. L. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics: General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Birkhäuser, New York (2012).
14. D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin et al., Phys. Scripta **87**, 038104 (2013).
15. V. M. Kuleshov, V. D. Mur, N. B. Narozhny et al., Phys. Usp. **58**, 785 (2015).
16. B. L. Voronov, D. M. Gitman, A. D. Levin et al., Theor. Math. Phys. **187**, 633 (2016).
17. J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano, Nucl. Phys. B **424**, 595 (1994).
18. T. Ando, J. Phys. Soc. Japan **75**, 074716 (2006).
19. H. Raza (Ed.), *Graphene Nanoelectronics. Metrology, Synthesis Properties, and Applications*, Springer, New York (2012).

20. N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Pitman, Boston (1981).
21. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Elements of Quantum Electrodynamics*, Israel Program for Sci. Tr., London (1962).
22. I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series, and Products*, Acad. Press, San Diego (2014).
23. A. Érdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger et al., *Higher Transcendental Functions*, Vol. 2, McGraw-Hill, New York (1953).
24. M. I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, New York (2012).
25. Y. Wang, V. W. Brar, A. V. Shytov et al., *Nat. Phys.* **8**, 653 (2012).
26. K. S. Gupta and S. Sen, *Phys. Rev. B* **78**, 205429 (2008).
27. V. R. Khalilov and K. E. Lee, *Theor. Math. Phys.* **169**, 1683 (2011).
28. V. S. Popov, *Sov. J. Nuc. Phys. USSR* **12**, 235 (1971); *Sov. Phys. JETP* **60**, 1228 (1971).
29. Ya. B. Zel'dovich and V. S. Popov, *Sov. Phys. Usp.* **14**, 673 (1972).