ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 6, стр. 1070–1089

БЕЗМАССОВЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ В ГРАФЕНЕ В ОКРЕСТНОСТИ КУЛОНОВСКИХ ПРИМЕСЕЙ

А. И. Бреев [a*], *Д. М. Гитман* [a,b**]

[a] *Томский государственный университет*
634050, Томск, Россия

[b] *Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук*
119991, Москва, Россия

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

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

DOI: 10.31857/S0044451021060079

1. ВВЕДЕНИЕ

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

Корректное описание таких возбуждений (часто называемых ниже квазичастицами) в окрестности точечной кулоновской примеси требует правильного определения дираковского гамильтониана как самосопряженного (в дальнейшем с.с.) оператора в соответствующем гильбертовом пространстве. А для движения электрона в кулоновском поле проблема определения гамильтониана как с.с. оператора является нетривиальной только для ядер с большими Z ($Z > 119$), которые не возникают в лабораторных условиях, для кулоновских примесей в графене этот порог значительно меньше из-за свойств дираковских квазичастиц в дираковской модели графена.

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

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

* E-mail: breev@mail.tsu.ru
** E-mail: dmitrygitman@hotmail.com

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

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

Статья организована следующим образом. В разд. 2 приведены определения базовых понятий и соотношений, объясняющих постановку задачи. В разд. 3 описана математически строгая процедура сведения проблемы построения с.с. вращательно-инвариантного дираковского гамильтониана в полном гильбертовом пространстве к задаче построения с.с. одномерных парциальных радиальных гамильтонианов с определенным угловым моментом. Затем, в разд. 4, исследуется общее решение радиальных уравнений для безмассового уравнения Дирака в 2 + 1 измерении. В разд. 5 строятся с.с. парциальные радиальные гамильтонианы с произвольным допустимым значением углового момента j. Раздел 6 посвящен описанию особенностей полного гамильтониана рассматриваемой модели в зависимости от заряда примеси Z. В разд. 7 с помощью полученных результатов исследуется локальная плотность состояний в графене. Раздел 8 представляет собой краткое заключение.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{gathered}\check{\mathcal{H}}_s = \hbar v_F\left(-i\left[s\sigma_x\partial_x + \sigma_y\partial_y\right] - \frac{g}{\rho}\right),\\ g = \frac{1}{\hbar v_F}\frac{Ze^2}{\epsilon} = \alpha_F\frac{Z}{\epsilon} = \alpha_F Z_{eff}, \quad Z_{eff} = \frac{Z}{\epsilon}.\end{gathered} \tag{2}$$

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

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

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

$$\begin{aligned}\check{H}_s = -i(s\cos\phi\sigma_x + \sin\phi\sigma_y)\frac{\partial}{\partial\rho} + \\ + \frac{i}{\rho}(s\sin\phi\sigma_x - \cos\phi\sigma_y)\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{g}{\rho}.\end{aligned} \tag{3}$$

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

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

3. РЕДУКЦИЯ К РАДИАЛЬНОЙ ЗАДАЧЕ

Начнем с определения начальных симметрических операторов $\hat{H}_s^{in}$ в гильбертовом пространстве $\mathfrak{H} = L^2(\mathbb{R}^2) \oplus L^2(\mathbb{R}^2)$, ассоциированных с соответствующими дифференциальными выражениями $\check{H}_s$ (3). 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 кулоновского потенциала в начале координат, дополнительно потребуем обращения в нуль дублетов $D(\hat{H}_s^{in})$ в некоторой окрестности начала координат, в общем случае различной для каждого дублета. Заметим, что области определения $D(\hat{H}_s^{in})$ (которые совпадают для обоих значений s) плотны в $\mathfrak{H}$. Таким образом, операторы $\hat{H}_s^{in}$ определяются как

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

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

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

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

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

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

$$\begin{gathered}\mathfrak{H} = \sum_j{}^{\oplus}\mathfrak{H}_{-1,j} = \sum_j{}^{\oplus}\mathfrak{H}_{+1,j},\\ j = \pm 1/2, \pm 3/2\ldots\end{gathered} \tag{4}$$

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

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

являющихся собственными функциями оператора $\hat{J}_s$,

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

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

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

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

со скалярным произведением

$$(F_1, F_2) = \int\limits_0^\infty {F_1}^+(\rho) F_2(\rho)\, d\rho = \\ = \int\limits_0^\infty \left[\overline{f_1(\rho)}\ f_2(\rho) + \overline{g_1(\rho)}\ g_2(\rho)\right] d\rho,$$

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

$$\|\Psi_{sj}\|^2 = \int\limits_0^\infty \left[|f(\rho)|^2 + |g(\rho)|^2\right] d\rho$$

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

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

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

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

Тогда

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

будем называть парциальной радиальной дифференциальной операцией.

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

$$\hat{H}_s = \sum_j {}^{\oplus}\ \hat{H}_{sj}, \tag{9}$$

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

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

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

4. ОБЩЕЕ РЕШЕНИЕ РАДИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

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

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

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

Система (10), записанная покомпонентно, имеет вид

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

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

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

В новых переменных и для новых функций получим

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

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

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

где A, B — произвольные постоянные, а

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

Используя соотношения

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

найдем общее решение системы (11) в виде

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

Как следует из равенств

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

общее решение радиальных уравнений можно представить в следующей форме:

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

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

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

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

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

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

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

Введем новую величину Υ_+ следующим образом:

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

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

$$F_{1}(\rho;W)=F(\rho,\Upsilon_{+},W)|_{A=1,\,B=0}= =\rho^{\Upsilon_{+}}d_{+}+O(\rho^{\Upsilon_{+}+1}),\quad\rho\to 0,$$
$$F_{2}(\rho;W)=F(\rho,-\Upsilon_{+},W)|_{A=1,\,B=0}= =\rho^{-\Upsilon_{+}}d_{-}+O(\rho^{-\Upsilon_{+}+1}),\quad\rho\to 0.$$

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

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

Для $\Upsilon_+=\gamma$ имеем

$$\begin{gathered}F_{1}(\rho;E)=\frac{2\Gamma(2\gamma)e^{-\pi\tilde{g}/2}}{|\Gamma(\gamma-i\tilde{g})|}\times \\ \times|2E|^{-\gamma}\left(u_{+}(\gamma)\mathcal{F}_{\gamma-1}(-\tilde{g},|E|\,\rho)-\right. \\ \left.-\operatorname{sgn}(sjE)u_{-}(\gamma)\mathcal{F}_{\gamma}(-\tilde{g},|E|\,\rho)\right), \\ F_{2}(\rho;E)=F_{1}(\rho;E)|_{\gamma\to-\gamma}, \\ u_{+}(\Upsilon)=\begin{pmatrix}1\\ \dfrac{\Upsilon-sj}{g}\end{pmatrix},\;u_{-}(\Upsilon)=\begin{pmatrix}\dfrac{\Upsilon-sj}{g}\\ 1\end{pmatrix}, \\ \tilde{g}=\operatorname{sgn}(E)g\,.\end{gathered}\tag{14}$$

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

$$F_{1}(\rho;E)=2\Gamma(2i\sigma)\sqrt{\frac{(\sigma-\tilde{g})\operatorname{sh}(\sigma-\tilde{g})}{\pi}}\times \times e^{-\pi\tilde{g}/2}\,|2E|^{-i\sigma}\Big[u_{+}(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma-1}(-\tilde{g},|E|\,\rho)- -\frac{sj}{\tilde{g}-\sigma}u_{-}(i\sigma)\mathcal{F}_{i\sigma}(-\tilde{g},|E|\,\rho)\Big],$$

$$F_{2}(\rho;E)=\overline{F_{1}(\rho;E)}.$$

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

$$F_{3}(\rho;W)=B(W)z^{\Upsilon}e^{-z/2}\left[\Psi(\alpha,\beta;z)\varrho_{+}- - b_{-}\Psi(\alpha+1,\beta;z)\varrho_{-}\right]= =\Gamma(-2\Upsilon_{+})F_{1}(\rho;W)-\frac{g\omega(W)}{2\Upsilon_{+}}F_{2}(\rho;W),$$

где

$$\omega(W)=-i\frac{\Gamma(1+2\Upsilon_{+})\Gamma(-\alpha_{-})}{a\Gamma(\alpha)\left[\kappa-\Upsilon_{+}\right]}\left(2e^{-i\pi/2}W\right)^{-2\Upsilon_{+}}= =-\mathrm{Wr}(F_{1},F_{3}),$$
$$B(W)=\frac{1}{2}\Gamma(-\alpha_{-})\left[1+\frac{\kappa+\Upsilon_{+}}{ig}\right]\left(2e^{-i\pi/2}W\right)^{-\Upsilon_{+}}.$$

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

5. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ РАДИАЛЬНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ

Поскольку все возможные с.с. парциальные радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z,j,s)$ ассоциируются с общим дифференциальным выражением $\check{h}(Z,j,s)$ в (8), их определение сводится к указанию их области определения $D_{h(Z,j,s)}\subset\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$. Каждый оператор $\hat{h}(Z,j,s)$ представляет собой с.с. расширение начального симметрического оператора $\hat{h}_{in}(Z,j,s)$ в (7), определенного в пространстве $\mathbb{C}_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ гладких дублетов с компактным носителем на полуоси $\mathbb{R}_+$. В то же время каждый оператор $\hat{h}(Z,j,s)$ есть с.с. сужение сопряженного оператора $\hat{h}_{in}^+(Z,j,s)$, который действует на так называемой естественной области определения $D^*_{\check{h}(Z,j,s)}(\mathbb{R}_+)$ 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

$$\check{h}(Z,j,s)F(\rho)\in\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+),$$
$$D_{h_{in}(Z,j,s)}\subset D_{h(Z,j,s)}\subseteq D^*_{\check{h}(Z,j,s)}(\mathbb{R}_+).$$

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

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

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

$$\Delta_*(F)=$$
$$=\left(F,\hat{h}_{in}^+F\right)-\left(\hat{h}_{in}^+F,F\right)=2i\,\mathrm{Im}\left(F,\hat{h}_{in}^+F\right)=$$
$$=\int_0^\infty F^+(\rho)\left(\check{h}F\right)(\rho)\,d\rho-\int_0^\infty\left(\check{h}F\right)^+(\rho)F(\rho)\,d\rho. \quad (15)$$

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

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

$$\Delta_*(F)=[F](\infty)-[F](0),\ [F](\infty)=\lim_{\rho\to\infty}[F](\rho),$$
$$[F](0)=\lim_{\rho\to 0}[F](\rho),$$
$$[F](\rho)=-iF^+(\rho)\sigma_yF(\rho)=-\left[\overline{f(\rho)}g(\rho)-\overline{g(\rho)}f(\rho)\right].$$

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

$$\Delta_*(F)=-[F](0)=$$
$$=\lim_{\rho\to 0}\left(\overline{f(\rho)}g(\rho)-\overline{g(\rho)}f(\rho)\right). \quad (16)$$

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

$$F(\rho)=c_1u_1(\rho)+c_2u_2(\rho)+I_1(\rho)+I_2(\rho),$$
$$c_1,c_2=\mathrm{const},$$
$$u_1(\rho)=d_+\rho^{\Upsilon_+},$$
$$u_2(\rho)=\begin{cases} d_-\rho^{-\Upsilon_+}, & g\neq g_c(j),\\ d_0(\rho), & g=g_c(j),\end{cases}$$
$$\check{h}(Z,j,s)u_k(\rho)=0, \quad (17)$$
$$d_\pm=\begin{pmatrix}1\\(\kappa\pm\Upsilon_+)/g\end{pmatrix},$$
$$d_0(\rho)=\begin{pmatrix}\ln\rho-\zeta(j,s)g_c^{-1}(j)\\ \zeta(j,s)\ln\rho\end{pmatrix},$$
$$\zeta(j,s)=\mathrm{sgn}(\kappa)=-s\,\mathrm{sgn}(j),$$

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

$$I_1(\rho) = \begin{cases} \dfrac{g}{2\Upsilon_+}\displaystyle\int\limits_{\rho}^{\rho_0} [u_1(\rho)\otimes u_2(\rho')]\, G(\rho')d\rho', \quad \Upsilon = \Upsilon_+ \ge 1/2, \quad \rho_0 > 0, \\ -\dfrac{g}{2\Upsilon_+}\displaystyle\int\limits_{0}^{\rho} [u_1(\rho)\otimes u_2(\rho')]\, G(\rho')d\rho', \quad \Upsilon = \Upsilon_+ < 1/2, \quad \Upsilon = i\sigma, \quad \sigma > 0, \\ g_c(j)\displaystyle\int\limits_{0}^{\rho} [u_1(\rho)\otimes u_2(\rho')]\, G(\rho')d\rho', \quad \Upsilon = 0, \end{cases} \tag{18}$$

$$I_2(\rho) = \begin{cases} \dfrac{g}{2\Upsilon_+}\displaystyle\int\limits_{\rho}^{0} [u_2(\rho)\otimes u_1(\rho')]\, G(\rho')d\rho', \quad \Upsilon \ne 0, \\ -g_c(j)\displaystyle\int\limits_{0}^{\rho} [u_2(\rho)\otimes u_1(\rho')]\, G(\rho')d\rho', \quad \Upsilon = 0. \end{cases}$$

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

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

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

Далее, будем строить с.с. радиальные гамильтонианы $\hat{h}(Z,j,s)$ как с.с. расширения оператора $\hat{h}_{in}(Z,j,s)$ в каждой из четырех областей изменения заряда примеси Z.

5.1. Несингулярная область

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\lim_{\gamma\to\ell/2}\frac{F_2(\rho;W)}{\Gamma(-2\gamma)}=-a_\ell(W)\;F_1(\rho;W)|_{\gamma=\ell/2},$$
$$a_\ell(W)=2\gamma\left[g\,\omega(W)|_{\gamma=\ell/2}\right]^{-1},$$

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

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

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

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

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

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

при $\rho\to0$.

Так как дублеты $F_1(\rho;W)$ и $U_\ell(\rho;W)$ линейно независимы, $\operatorname{Wr}(F_1,U_\ell)=-2\gamma/g\neq0$, то в окрестности $\ell-1<2\gamma<\ell+1$ точки $\gamma=\ell/2$ дублет $F_3(\rho;W)$ допускает разложение:

$$F_3(\rho;W)=\omega(W)\left[A_\ell(W)F_1(\rho;W)+\frac{g}{2\gamma}U_\ell(\rho;W)\right],$$
$$A_\ell(W)=\Gamma(-2\gamma)\left[\omega^{-1}(W)-\omega^{-1}(W)|_{\gamma=\ell/2}\right].$$

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

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

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

$$\sigma_1'(E)=\pi^{-1}\operatorname{Im}A_\ell(E+i0).$$

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

$$\sigma_1'(E)|_{\gamma=\ell/2}=\lim_{\gamma\to\ell/2}\sigma_1'(E)|_{\gamma\neq\ell/2},$$
$$\sigma_1'(E)|_{\gamma\neq\ell/2}=\pi^{-1}\Gamma(-2\gamma)\operatorname{Im}\omega^{-1}(E+i0).$$

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

$$\sigma_1'(E)=\pi^{-1}\Gamma(-2\gamma)\operatorname{Im}\omega^{-1}(E)=$$
$$=\left[\frac{|2E|^\gamma}{|\Gamma(ig-\gamma)|\,\Gamma(2\gamma+1)}\right]^2\times$$
$$\times\frac{\pi(\kappa-\gamma)e^{\operatorname{sgn}(E)\pi g}}{\kappa\,(\operatorname{ch}(2\pi g)-\cos(2\pi\gamma))}>0.$$

Так как функция $\omega(E)$ отлична от нуля для всех E, непрерывна на $(-\infty,0)\cup(0;\infty)$ и принимает комплексные значения, то значения $E\in(-\infty,\infty)$ являются точками непрерывного спектра оператора $\hat{h}_1(Z,j,s)$. В данных точках спектра функция $\sigma_1'(E)$ положительна, $\sigma_1'(E)=Q_1^2(E)>0$, где $Q_1(E)=\sqrt{\sigma_1'(E)}$ — нормировочный множитель для соответствующей (обобщенной) собственной функции $U_1(\rho;E)$ непрерывного спектра.

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

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

Ортонормированные (обобщенные) собственные функции $U_{1E}(\rho)$, $|E|\geq0$ непрерывного спектра, отвечающие парциальным радиальным гамильтонианам $\hat{h}_1(Z,j,s)$, образуют полную ортонормированную систему в пространстве $\mathbb{L}^2(\mathbb{R}_+)$ в смысле формул обращения (см. [12]) и имеют вид

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

5.2. Субкритическая область

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

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

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

$$\Delta_*(F)=\frac{2\gamma}{g}\left(\overline{c_2}c_1-\overline{c_1}c_2\right).$$

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

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

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

$$D_{h_{2,\nu}(Z,j,s)}=\Big\{F(\rho):F(\rho)\in D^*_{\check{h}(Z,j,s)}(\mathbb{R}_+), \\ F\ \text{удовлетворяет}\,(23)\Big\}.$$

Обратимся к спектральному анализу с.с. операторов $\hat{h}_{2,\nu}(Z,j,s)$. В качестве дублета, определяющего простой направляющий функционал, выберем вещественно-целый дублет

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

Построим соответствующую функцию Грина:

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

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

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

$$F_3(\rho;W)=\frac{g}{2\gamma}\left[\tilde{\omega}_1U_{2,\nu}(\rho;W)+\omega_1\tilde{U}_{2,\nu}(\rho;W)\right], \\ \tilde{U}_{2,\nu}(\rho;W)=-F_1(\rho;W)\sin\nu+F_2(\rho;W)\cos\nu, \\ \tilde{\omega}_1(W)=\omega(W)\sin\nu-g^{-1}\Gamma(1-2\gamma)\cos\nu.$$

Тогда

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5.3. Критическая область

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

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

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

при $\gamma = 0$, $\rho\to 0$:

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

Отсюда для формы асимметрии получаем

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

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

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

где постоянный дублет $d_+ = d_+|_{\gamma=0} = (1,\zeta)^T$ и дублет $d_0(\rho)$, зависящий от ρ, определяется в (17). Таким образом, область определения $D_{h_{3,\nu}(Z,j,s)}$ гамильтониана $\hat{h}_{3,\nu}(Z,j,s)$ имеет вид

$$\begin{gathered} D_{h_{3,\nu}(Z,j,s)} = \Big\{F(\rho) : F(\rho)\in D^*_{\check{h}(Z,j,s)}(\mathbb{R}_+), \\ F \text{ удовлетворяет } (25)\Big\}. \end{gathered}$$

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

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

Соответствующий вронскиан имеет вид

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

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

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

где

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

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

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

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

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

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

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

Тогда

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\mathrm{spec}\;\hat{h}_{3,\nu}\left(Z,j,s\right) = (-\infty,\infty).$$

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

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

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

5.4. Сверхкритическая область

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

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

Для формы асимметрии получаем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

из которого следует

$$G(c-0,c+0,E+i0)= \\ =\omega_{4,\nu}^{-1}(E+i0)U_{4,\nu}(c;E)\otimes U_{4,\nu}(c;E)- \\ -\frac{g}{4\sigma}U_{4,\nu}(c;E)\otimes \tilde{U}_{4,\nu}(c;E),$$

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

$$\tilde{U}_{4,\nu}(\rho;W)=e^{i\nu}F_1(\rho,W)+e^{-i\nu}F_2(\rho,W).$$

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

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

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

$$\sigma'_{4,\nu}(E)=\frac{1}{\pi}\operatorname{Im}\frac{1}{\omega_{4,\nu}(E)}=-\frac{\delta}{4\sigma}\frac{A_-}{A_++B_s(\nu;E)},$$

$$A_\pm=\frac{\pi g^2}{4\sigma j}\left[\operatorname{sh}^{-1}(\pi\sigma)-\operatorname{ch}^{-1}(\pi\sigma)\right]\times \\ \times\left\{e^{2\pi\sigma}\operatorname{sh}^{-1}(\pi\left[g-\delta\sigma\right])\pm\operatorname{sh}^{-1}(\pi\left[g+\delta\sigma\right])\right\},$$

$$B_s(\nu;E)=2\operatorname{Re}\left\{(j+is\sigma)\Gamma\left(-i(g-\sigma)\right)\Gamma\left(i(g+\sigma)\right)\times \\ \times\,\Gamma^2(-2i\sigma)\exp\left(2i\sigma\ln|2E|-2i\nu\right)\right\},$$

$$\delta=\operatorname{sgn}(E).$$

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

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

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

$$U_{4,\nu}(\rho)=Q_{4,\nu}(E)U_{4,\nu}(\rho;E)= \\ =iQ_{4,\nu}(E)\left[e^{i\nu}F_1(\rho,W)-e^{-i\nu}F_2(\rho,W)\right], \\ Q_{4,\nu}(E)=\sqrt{\sigma'_{4,\nu}(E)}. \tag{28}$$

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

6. САМОСОПРЯЖЕННЫЕ ПОЛНЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ

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

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

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

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

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

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

и удовлетворяющих следующим неравенствам:

$$g_c(k)<g_s(k+1)<g_c(k+1)<g_s(k+2). \tag{29}$$

Введем интервалы $\Delta(k)$:

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

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

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

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 $i = 1,2,3$: $g \Longrightarrow (k,i)$, такую что $g \in G_i$. Тогда, как следует из результатов разд. 5.1, 5.2, получим следующую классификацию:

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

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

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

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

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

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

7. ЛОКАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

Локальная плотность состояний на единицу поверхности в графене определяется выражением

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

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

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

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

(30). Из равенства $\check{h}(Z,j,s)=\check{h}(Z,-j,-s)$ следует $n_j(\rho;E)|_{s=+1}=n_{-j}(\rho;E)|_{s=-1}$. Отсюда очевидно, что сумма $n_j(\rho;E)+n_{-j}(\rho;E)$ не зависит от выбора параметра $s=\pm1$. Таким образом, имеет место сохранение симметрии между выбором двух подрешеток в графене в поведении локальной плотности состояний (31).

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned}
&n_j^{2,\nu_1}(\rho;E)=\frac{1}{2\pi\rho}\left|U_{2\nu_1,E}(\rho)\right|^2\frac{1}{2\pi^2\rho}\,\frac{\varrho_\gamma(\rho)\cos^2\nu_1+\varrho_{-\gamma}(\rho)\sin^2\nu_1+\operatorname{Re}(\varrho(\rho))\sin(2\nu_1)/g}{\varrho_\gamma(\infty)\cos^2\nu_1+\varrho_{-\gamma}(\infty)\sin^2\nu_1+\operatorname{Re}(\varrho(\infty))\sin(2\nu_1)/g},\\
&\varrho_\gamma(\rho)=\frac{\left|\Phi_\gamma(\rho)\right|^2}{j+s\gamma}\rho^{2\gamma},\quad \varrho(\rho)=\frac{g-i\gamma}{j}\,\Phi_\gamma(\rho)\Phi_{-\gamma}^*(\rho),\\
&\varrho_\gamma(\infty)=\lim_{\rho\to\infty}\varrho_\gamma(\rho)=\frac{\Gamma^2(1+2\gamma)e^{-\delta\pi g}\left|2E\right|^{-2\gamma}}{(j+s\gamma)\Gamma(1-ig+\gamma)\Gamma(1+ig+\gamma)},\\
&\varrho(\infty)=\lim_{\rho\to\infty}\varrho(\rho)=\frac{2\gamma}{j}\frac{\operatorname{sh}\left(\pi\left[g-i\gamma\right]\right)}{\sin\left(2\pi\gamma\right)}e^{-\delta\pi(g+i\gamma)}.
\end{aligned} \quad (34)$$

В пределе $g\to0$ величина $n_j^1(\rho;E)$ выражается через функции Бесселя:

$$\lim_{g\to0}n_j^1(\rho;E)=\left[J_{|j|-1/2}(E\rho)+J_{|j|+1/2}(E\rho)\right]\frac{|E|}{4\pi},$$

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

$$\lim_{g\to0}\sum_{j=-\infty}^{\infty}n_j^1(\rho;E)=\frac{|E|}{2\pi}. \quad (35)$$

На рис. 1 показаны зависимости плотности состояний $N_0(\rho,\nu_1;E)$ от энергии квазичастицы для $\rho=1$, $g=0.3$. Для малых энергий, $E\to0$, имеем

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

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

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

и плотность состояний определяется только некритической областью,

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

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

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

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

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

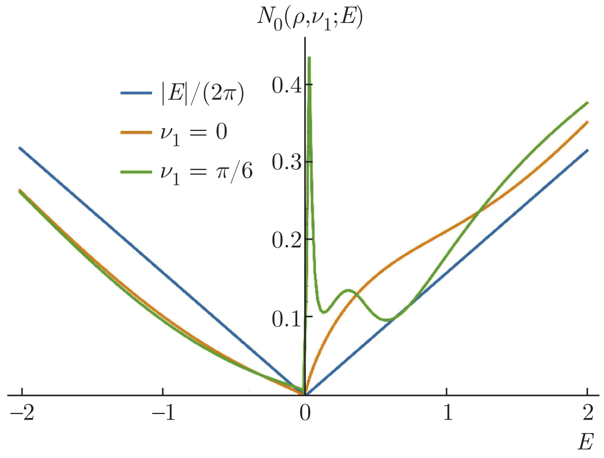

Рис. 1. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_0(\rho,\nu_1;E)$ для $\rho = 1$, $g = 0.3$ и $\nu_1 = 0,\ \pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

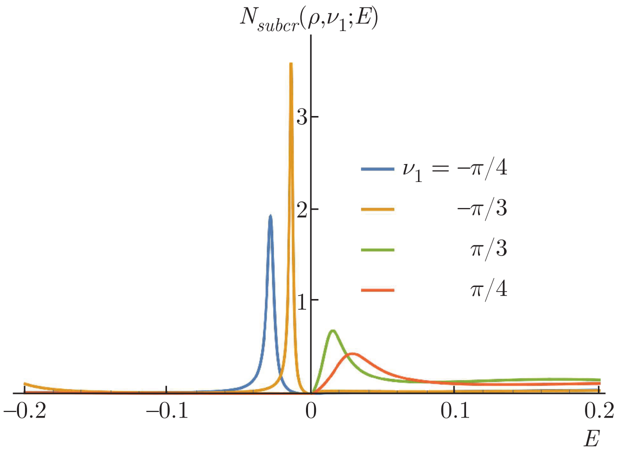

Рис. 2. (В цвете онлайн) Зависимости вклада $N_{subcr}(\rho,\nu_1;E)$ от энергии E для $\rho = 1$, $g = 0.3$ и различных значений параметра с. с. расширения ν_1

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

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

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

$$N_{subcr}(\rho,\nu_1,E) \sim \frac{|E|}{2\pi}\left[1 + \frac{2\,\mathrm{tg}\,\nu}{\rho} + \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{tg}\,\nu}{g\rho}\right)^2\right], \\ E \to 0, \quad g \to 0.$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

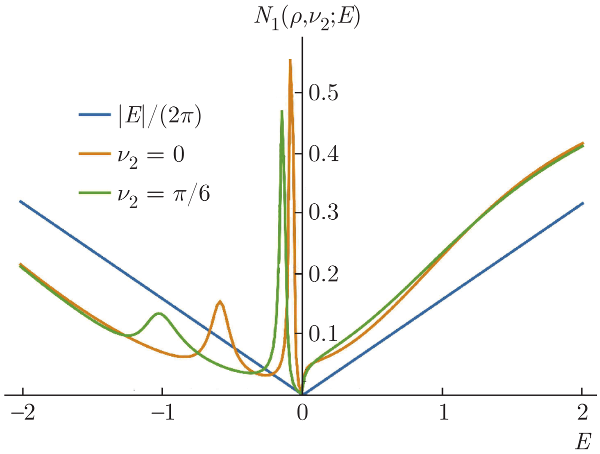

Рис. 3. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_1(\rho, \nu_2; E)$ для $\rho = 1$, $g = 0.5$ и $\nu_2 = 0$, $\pi/6$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

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

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

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

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

Здесь

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

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

и

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

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

В терминах кулоновских волновых функций имеем

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

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

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

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

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

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

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

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

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

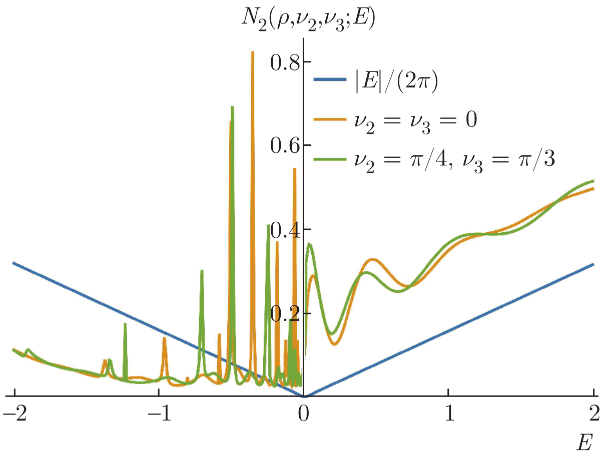

Рис. 4. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_2(\rho,\nu_2,\nu_3;E)$ для $\rho=1$, $g=3.5$ для $\nu_2=\nu_3=0$ и $\nu_2=\pi/6$, $\nu_3=\pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

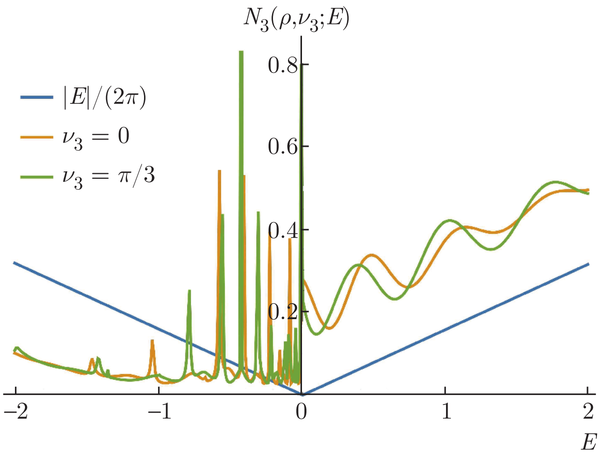

Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_3(\rho,\nu_3;E)$ для $\rho=3$, $g=3.7$ и $\nu_3=0,\ \pi/3$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

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

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

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

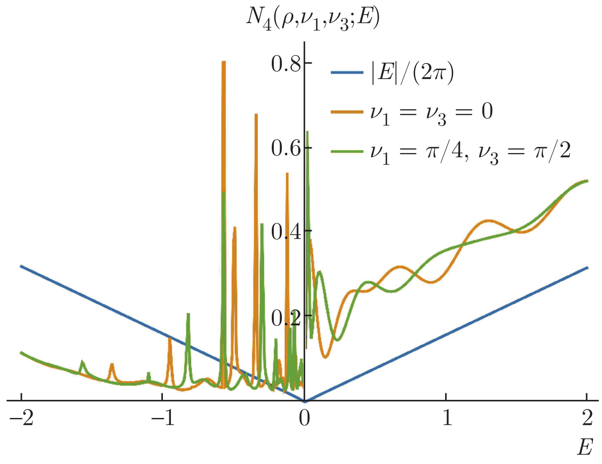

Рис. 6. (В цвете онлайн) Зависимости локальной плотности состояний $N_4(\rho,\nu_1,\nu_3;E)$ для $\rho=3$, $g=3.48$ для случаев $\nu_1=\nu_3=0$ и $\nu_1=\pi/4$, $\nu_3=\pi/2$. Синяя линия описывает локальную плотность состояний в отсутствие поля

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

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

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

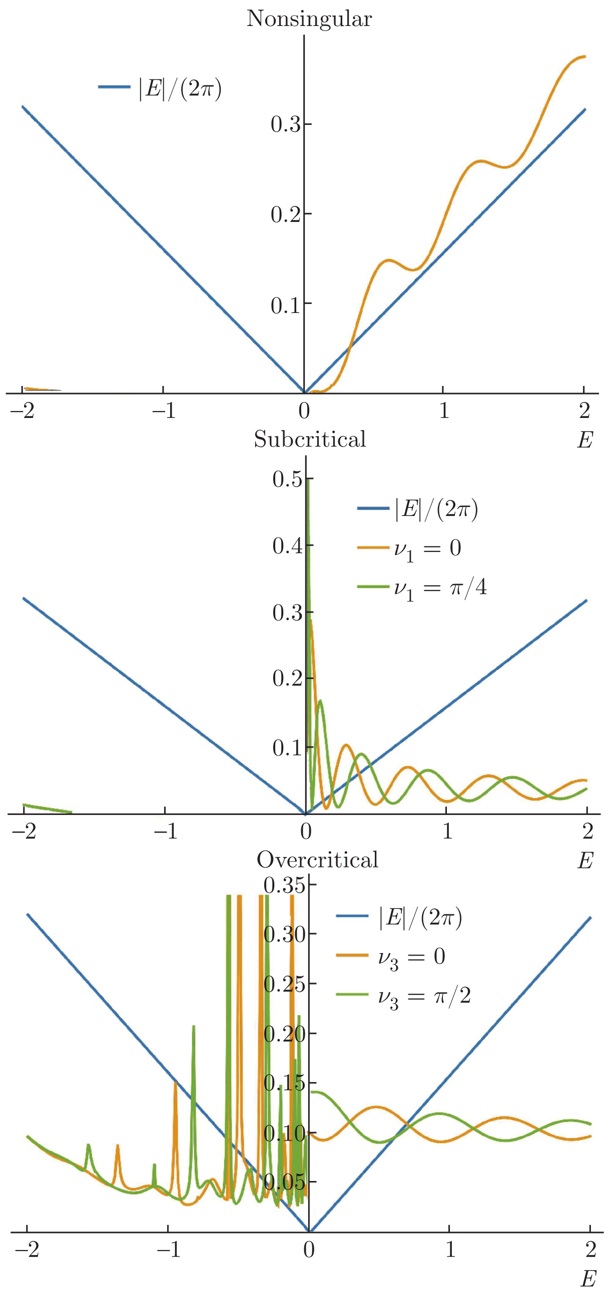

Рис. 7. (В цвете онлайн) Вклады несингулярной (Nonsingular), субкритической (Subcritical) и срехкритических (Overcritical) областей в $N_4(\rho,\nu_1,\nu_3;E)$

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

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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

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

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

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

ЛИТЕРАТУРА

1. K. Nomura and A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **98**, 076602 (2007).

2. V. N. Kotov, B. Uchoa, V. M. Pereira et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1067 (2012).

3. V. M. Pereira, V. N. Kotov, and A. C. Neto, Phys. Rev. B **78**, 085101 (2008).

4. E. V. Gorbar, V. P. Gusynin, and O. O. Sobol, Low Temp. Phys. **44**, 371 (2018).

5. O. V. Gamayun, E. V. Gorbar, and V. P. Gusynin, Phys. Rev. B **80**, 165429 (2009).

6. A. H. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

7. M. I. Katsnelson, *Graphene*: *Carbon in Two Dimensions*, Cambridge Univ. Press, New York (2012).

8. V. M. Pereira, V. M. Nilsson, and A. C. Neto, Phys. Rev. Lett. **99**, 166802 (2007).

9. D. Haberer, D. V. Vyalikh, S. Taioli et al., Nano Lett. **10**, 3360 (2010).

10. А. И. Бреев, Р. Феррейра, Д. М. Гитман, Б. Л. Воронов, ЖЭТФ **157**, 847 (2020).

11. Б. Л. Воронов, Д. М. Гитман, И. В. Тютин, ТМФ **150**, 41 (2007).

12. D. M. Gitman, I. V. Tyutin, and B. L. Voronov, *Self-adjoint Extensions in Quantum Mechanics*: *General Theory and Applications to Schrödinger and Dirac Equations with Singular Potentials*, Birkäuser, New York (2012).

13. D. M. Gitman, A. D. Levin, I. V. Tyutin et al., Phys. Scripta **87**, 038104 (2013).

14. *Graphene Nanoelectronics. Metrology, Synthesis Properties, and Applications*, ed. by H. Raza, Springer, New York (2012).

15. N. I. Akhiezer and I. M. Glazman, *Theory of Linear Operators in Hilbert Space*, Pitman, Boston (1981).

16. A. I. Akhiezer and V. B. Berestetskii, *Elements of Quantum Electrodynamics*, Israel Program for Sci. Tr., London (1962).

17. M. Abramovitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Nat. Bureau Stand. (1972).

18. A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano, Europhys. Lett. **77**, 47002 (2007).

19. A. V. Shytov, M. I. Katsnelson, and L. S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **99**, 246802 (2007).

20. V. R. Khalilov and K. E. Lee, Int. J. Mod. Phys. A **27**, 1250169 (2012).