

12,13,18

# Рассеяние электронов в монослойном графене: модель кольцеобразной ямы

© С.А. Ктиоров<sup>1</sup>, Н.Е. Фирсова<sup>2</sup><sup>1</sup> Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия<sup>2</sup> Институт проблем машиноведения РАН, Санкт-Петербург, Россия

E-mail: ktitorov@mail.ioffe.ru, nef2@mail.ru

(Поступила в Редакцию 1 июня 2010 г.)

Рассмотрена задача рассеяния электронов в монослойном графене в рамках предложенной нами ранее модели короткодействующего дефекта. Электронные состояния определяются уравнением Дирака для 2-спинорной волновой функции. Возмущение моделируется несимметричной по зонному индексу кольцеобразной потенциальной ямой. Эта асимметрия возникает благодаря локальному дефекту структуры и описывается локальным возмущением массы в уравнении Дирака. Переходы между критическими точками зоны Бриллюэна  $K$  и  $K'$  не учитываются, что оправдано, если радиус возмущения конечен, но велик по сравнению с постоянной решетки. Получена точная формула для матрицы рассеяния. Результаты представлены в терминах фаз рассеяния и в геометрической форме соотношения между некоторыми 2-векторами. Характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний имеет форму некоторого условия ортогональности. Намечены пути вычисления таких наблюдаемых, как электропроводность графена, базирующиеся на решенной нами задаче рассеяния.

## 1. Введение

Мы рассматриваем в настоящей работе проблему рассеяния электронов в монослойном графене точечными дефектами, которые моделируются матричным короткодействующим потенциалом. Электронные состояния являются решениями 2 + 1-мерного уравнения Дирака для двухкомпонентных спинорных волновых функций. Ранее такие задачи рассматривались для симметричного по зонному индексу короткодействующего потенциала [1–3]. В нашей работе [4] была предложена и проанализирована модель дефекта, учитывающая возможную асимметрию матричных элементов короткодействующего потенциала по зонному индексу. Это означает, что короткодействующий дефект в нашем случае описывается некоторой эрмитовой матрицей по зонным индексам. Мы рассмотрели здесь случай диагональной матрицы возмущения, который сводится к суперпозиции локальных возмущений потенциала и массы (щели). Используемая кольцевая геометрия потенциала позволяет исключить глубокие резонансные состояния, нефизические в кристаллической решетке, а также осуществляет необходимую в двумерной задаче регуляризацию. Дельта-функционная модель была рассмотрена в наших работах [4,5]. В настоящей публикации рассматривается более реалистичная модель потенциального и массового возмущения кольцевой потенциальной ямой. Мы рассмотрим проблему рассеяния такой ямой, причем будут получены точные явные формулы для данных рассеяния. Мы обсудим также применение этих формул для вычисления наблюдаемых.

## 2. Основные уравнения

Уравнение Дирака для электронных состояний в монослойном графене с описанным выше возмущением имеет вид [4]

$$\left[ -i\hbar v_F \sum_{\mu=1}^2 \alpha_{\mu} \partial_{\mu} - \beta (m + \delta m(r)) v_F^2 \right] \psi = (E - V(r)) \psi, \quad (1)$$

где  $v_F$  — фермиевская скорость зонных электронов,  $v_F = 10^8$  см/с,  $\alpha_{\mu}$  и  $\beta$  — дираковские матрицы,  $\beta = \sigma_3$ ,  $\alpha_1 = \sigma_1$ ,  $\alpha_2 = i\sigma_2$ ,  $\sigma_i$  — матрицы Паули,  $2mv_F^2 = E_g$  — щель в электронном спектре,  $\psi(\mathbf{r})$  — двухкомпонентный спинор. Щель в электронном спектре графена может появиться благодаря взаимному смещению подрешеток [6] или в результате динамического нарушения симметрии [7,8]. Спинорная структура учитывает двух-подрешеточную конфигурацию графена.  $\delta m(\mathbf{r})$  и  $V(\mathbf{r})$  — локальные возмущения массы (щели) и химического потенциала

$$V(r) = -a\Delta(r), \quad \delta m(r) = -b\Delta(r), \quad (2)$$

где  $\Delta(r)$  определено следующим образом:

$$\Delta(r) = \begin{cases} 1, & \text{если } r \in [r_1, r_2), \\ 0, & \text{если } r \notin [r_1, r_2). \end{cases} \quad (3)$$

Представим 2-спинор в следующем виде:

$$\psi_j(\mathbf{r}, t) = \frac{\exp(-iEt)}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} f_j(r) \exp[i(j - 1/2)\varphi] \\ g_j(r) \exp[i(j + 1/2)\varphi] \end{pmatrix}, \quad (4)$$

где  $j$  — квантовое число псевдospина;  $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ . В отличие от релятивистской теории это квантовое число не имеет отношения к настоящему спину и указывает на двукратное вырождение в биконической дираковской точке. Верхняя  $f_j(r)$  и нижняя  $g_j(r)$  компоненты спинора удовлетворяют системе уравнений

$$\frac{dg_j}{dr} + \frac{j}{r} g_j - (E - m)f_j = (a + b)\Delta(r)f_j, \quad (5)$$

$$-\frac{df_j}{dr} + \frac{j}{r} f_j - (E + m)g_j = (a - b)\Delta(r)g_j. \quad (6)$$

Эти уравнения обладают симметрией

$$f_j \leftrightarrow g_j, \quad E \rightarrow -E, \quad j \rightarrow -j, \quad a \rightarrow -a. \quad (7)$$

### 3. Матрица рассеяния и характеристическое уравнение

При  $r \in [r_1, r_2]$  получаем из уравнений (5) и (6)

$$\frac{d^2 f_j}{dr^2} + \left[ E^2 - m^2 - \frac{j(j-1)}{r^2} \right] f_j = 0. \quad (8)$$

Это уравнение сводится к уравнению Бесселя. Его регулярное в нуле решение при  $r < r_1$  имеет вид

$$f_j(r) = c_1 \sqrt{\kappa r} J_{j-1/2}(\kappa r), \quad (9)$$

$$g_j(r) = c_1 \lambda^{-1} \sqrt{\kappa r} J_{j+1/2}(\kappa r), \quad (10)$$

где  $\lambda = \sqrt{(E+m)/(E-m)}$ ,  $\kappa = \sqrt{E^2 - m^2}$ ,  $J_\nu(x)$  — функция Бесселя.

Введем функцию  $\varphi_j(r)$

$$\varphi_j(r) \equiv f_j/g_j. \quad (11)$$

Получаем из (9) и (10) в области  $0 \leq r < r_1$

$$\varphi_j^I(\kappa r) = \lambda J_{j-1/2}(\kappa r)/J_{j+1/2}(\kappa r). \quad (12)$$

При  $r \in [r_1, r_2]$  имеем из уравнений (3), (5) и (6)

$$\frac{d^2 f_j}{dr^2} + \left[ \tilde{E}^2 - \tilde{m}^2 - \frac{j(j-1)}{r^2} \right] f_j = 0, \quad (13)$$

где  $\tilde{E} = E + a$ ,  $\tilde{m} = m - b$ . Следовательно, функция  $\varphi_j(r)$  (11) может быть представлена при  $r \in [r_1, r_2]$  в следующем виде:

$$\varphi_j^II(r) = \tilde{\lambda} \frac{J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r) + C_j N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r)}{J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r) + C_j N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r)}, \quad (14)$$

где  $\tilde{\lambda} = \sqrt{(\tilde{E} + \tilde{m})/(\tilde{E} - \tilde{m})}$ ,  $\tilde{\kappa}^2 = \tilde{E}^2 - \tilde{m}^2$ . Аналогично имеем при  $r \geq r_2$

$$\varphi_j^III(r) = \lambda \frac{H_{j-1/2}^{(2)}(\kappa r) + S_j H_{j-1/2}^{(1)}(\kappa r)}{H_{j+1/2}^{(2)}(\kappa r) + S_j H_{j+1/2}^{(1)}(\kappa r)}. \quad (15)$$

Непрерывность компонент спинора приводит к условиям сшивки для функций  $\varphi_j(r)$  на границах между областями. В результате получаем следующие выражения для коэффициентов  $C_j$  и  $S_j$ :

$$C_j = -[\lambda J_{j-1/2}(\kappa r_1) J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_1) - \tilde{\lambda} J_{j+1/2}(\kappa r_1) J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_1)] / [\tilde{\lambda} N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j+1/2}(\kappa r_1) - \lambda N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j-1/2}(\kappa r_1)], \quad (16)$$

$$S_j = -\frac{F_j^{(2)}}{F_j^{(1)}}, \quad (17)$$

где

$$F^{(\alpha)} = \lambda H_{j-1/2}^{(\alpha)}(\kappa r_2) [J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2)] - \tilde{\lambda} H_{j+1/2}^{(\alpha)}(\kappa r_2) [J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2)], \quad \alpha = 1; 2. \quad (18)$$

Подставляя (16) в (17), получаем явную формулу для  $S$ -матрицы. Постоянная  $S_j$  является фазовым фактором расходящейся волны, т.е. элементом  $S$ -матрицы в представлении углового момента. Так как  $H_n^{(2)}(z) = H_n^{(1)*}(z)$  для действительных  $z$ , матрица рассеяния унитарна везде в области непрерывного спектра. Уравнения (16), (17) и (18) решают проблему рассеяния электронов в графене для данного потенциала.

Приравняв нулю знаменатель выражения для  $S_j(E)$ , получаем характеристическое уравнение для связанных и резонансных электронных состояний

$$F^{(1)} = 0, \quad (19)$$

т.е. характеристическое уравнение

$$\frac{\lambda J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j-1/2}(\kappa r_1) - \tilde{\lambda} J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j+1/2}(\kappa r_1)}{\lambda N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j-1/2}(\kappa r_1) - \tilde{\lambda} N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_1) J_{j+1/2}(\kappa r_1)} = \frac{\lambda J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2) H_{j-1/2}^{(1)}(\kappa r_2) - \tilde{\lambda} J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2) H_{j+1/2}^{(1)}(\kappa r_2)}{\lambda N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2) H_{j-1/2}^{(1)}(\kappa r_2) - \tilde{\lambda} N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2) H_{j+1/2}^{(1)}(\kappa r_2)}. \quad (20)$$

При  $r_1 = 0$ ,  $r_2 = r_0$  получаем случай простой круговой ямы; при этом характеристическое уравнение принимает вид

$$\tilde{\lambda} J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_0) H_{j+1/2}^{(1)}(\kappa r_0) = \lambda J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_0) H_{j-1/2}^{(1)}(\kappa r_0). \quad (21)$$

Эти выражения допускают геометрическую интерпретацию. Введем векторы-столбцы

$$\mathbf{J}_j(r_1) = \begin{pmatrix} J_{j,1} \\ J_{j,2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\lambda} J_{j+1/2}(\kappa r_1) \\ -\lambda J_{j-1/2}(\kappa r_1) \end{pmatrix}, \quad (22)$$

$$\mathbf{h}_j^{(\alpha)}(r_2) = \begin{pmatrix} h_{j,1} \\ h_{j,2} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \tilde{\lambda} H_{j+1/2}^{(\alpha)}(\kappa r_2) \\ -\lambda H_{j-1/2}^{(\alpha)}(\kappa r_2) \end{pmatrix} \quad (23)$$

и матрицу

$$\hat{D}_j(r) = \begin{pmatrix} J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r) & J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r) \\ N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r) & N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r) \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Теперь выражение (16) можно переписать в следующем виде

$$C_j = \frac{\mathcal{J}_{j,1}}{\mathcal{J}_{j,2}}, \quad (25)$$

где вектор  $\mathcal{J}_j = \begin{pmatrix} \mathcal{J}_{j,1} \\ \mathcal{J}_{j,2} \end{pmatrix}$  определен как

$$\mathcal{J}_j(r_1) = \hat{D}_j(r_1) \mathbf{J}_j(r_1). \quad (26)$$

Формула (17) может быть переписана в следующем виде:

$$S_j = -\frac{(\hat{K}_j \mathbf{J}_j(r_1), \mathbf{h}_j^{(2)}(r_2))}{(\hat{K}_j \mathbf{J}_j(r_1), \mathbf{h}_j^{(1)}(r_2))}, \quad (27)$$

где  $(\mathbf{a}, \mathbf{b})$  — скалярное произведение векторов  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ , матрица  $\hat{K}_j$  определена соотношением

$$\hat{K}_j = \hat{D}_j^\dagger(r_2) \hat{\sigma}_1 \hat{D}_j(r_1). \quad (28)$$

Характеристическое уравнение принимает вид

$$(\hat{K}_j \mathbf{J}_j(r_1), \mathbf{h}_j^{(1)}(r_2)) = 0, \quad (29)$$

т.е. имеет вид условия ортогональности двумерных векторов.

#### 4. Свойства $S$ - и $T$ -матриц. Возможные приложения

Используя соотношения  $H_n^{(1)}(z) = J_n(z) + iN_n(z)$ ,  $H_n^{(2)}(z) = J_n(z) - iN_n(z)$ , можно записать  $S$ -матрицу в виде

$$S_j(E) = -\frac{A_j(E) + iB_j(E)}{A_j(E) - iB_j(E)} = \frac{B_j(E) + iA_j(E)}{B_j(E) - iA_j(E)}, \quad (30)$$

и, следовательно, она может быть представлена в стандартной форме [9]

$$S_j(E) = \exp[i2\delta_j(E)], \quad (31)$$

где фаза рассеяния дается выражением

$$\delta_j(E) = \arctan \frac{A_j(E)}{B_j(E)}. \quad (32)$$

Функции  $A_j(E)$  и  $B_j(E)$  определены следующим образом:

$$A_j = \lambda J_{j-1/2}(\kappa r_2) [J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2)] - \tilde{\lambda} J_{j+1/2}(\kappa r_2) [J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2)], \quad (33)$$

$$B_j = \tilde{\lambda} N_{j+1/2}(\kappa r_2) [J_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j-1/2}(\tilde{\kappa} r_2)] - \lambda N_{j-1/2}(\kappa r_2) [J_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2) + C_j N_{j+1/2}(\tilde{\kappa} r_2)], \quad (34)$$

где константа  $C_j$  определяется формулой (16). Из (16), (33) и (34) очевидным образом следует, что все фазовые сдвиги  $\delta_j(E)$  ( $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \dots$ ) стремятся к нулю при стремлении к нулю интенсивностей возмущения  $a$  и  $b$ .

Нетрудно показать, что в длинноволновом пределе фаза пропорциональна  $\kappa r_0$  в соответствии с общими принципами квантовой механики [2,9] (здесь  $r_0 \sim r_1, r_2$ ) (см. также [5]). Действительно, полагая  $E = m - \epsilon$ ,  $\epsilon \ll m$ ,  $\tilde{E} + \tilde{m} \approx 2m$ ,  $\tilde{E} - \tilde{m} \approx a + b$  и используя приближенные выражения для функции Макдональда  $K_\nu(x) \approx 2^\nu x^{-\nu} \Gamma(\nu)$ ,  $\nu \neq 0$ ,  $K_0(x) \approx \ln(2/x)$ , получаем следующее приближенное выражение для энергии связанного состояния вблизи края „своей“ зоны

$$\epsilon \approx [2/(mr_0^2)] \exp[-2/((a+b)mr_0^2)]. \quad (35)$$

Амплитуда рассеяния  $f(\theta)$  и транспортное сечение  $\Sigma_{tr}$  могут быть следующим образом выражены через матрицу рассеяния  $S_j(E)$  [2]:

$$f(\theta) = \frac{1}{i\sqrt{2\pi\kappa}} \sum_{j=\pm 1/2, \pm 3/2, \dots} [S_j(E) - 1] \exp[i(j-1/2)\theta], \quad (36)$$

$$\Sigma_{tr} = 2/\kappa \sum_{j=\pm 1/2, \pm 3/2, \dots} \sin^2(\delta_{j+1} - \delta_j). \quad (37)$$

В окрестности резонанса справедлива формула Брейта–Вигнера для фазы рассеяния [9]

$$\delta_j \approx \delta_j^{(0)} + \arctan \frac{\Gamma_j}{2(E_j^{(0)} - E)}, \quad (38)$$

где  $E_j^{(0)}$  и  $\Gamma_j$  — положение и ширина резонансного уровня,  $\delta_j^{(0)}$  — медленно меняющаяся фаза потенциального (фонового) рассеяния.

Полученные выше формулы могут быть использованы для вычисления болцмановской проводимости [10]

$$\sigma = \left( \frac{e^2}{2\pi\hbar} \right) \frac{2E_F}{\hbar} \tau_{tr}, \quad (39)$$

где транспортное время релаксации определено соотношением

$$1/\tau_{tr} = N_i v_F \Sigma_{tr}. \quad (40)$$

Здесь  $N_i$  — среднее число примесей на единицу площади,  $E_F = v_F \kappa_F$ . Представленные формулы для данных

рассеяния определяют особенности зависимости болъцмановской проводимости от химического потенциала и температуры. Соответствующие численные результаты будут представлены позднее.

С другой стороны, полученные здесь формулы для данных рассеяния могут быть использованы для вычисления плотности состояний и других наблюдаемых. Это может быть сделано в низшем порядке по концентрации примесей либо в каком-либо варианте приближения самосогласованного поля. Полученное здесь точное явное выражение для однопримесной  $S$ -матрицы, позволяющее вычислять амплитуду рассеяния, энергии связанных состояний и комплексные энергии резонансных состояний, позволяет также вычислить однопримесную точную  $T$ -матрицу, определенную на энергетической поверхности [11]

$$T_j^{\text{on}}(E) = (1/i)[S_j(E) - 1]. \quad (41)$$

Соответствующая  $T$ -матрица, определенная как на поверхности энергии, так и вне ее  $\hat{T}^{\text{off}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E)$  (здесь область определения  $\mathbf{k}$ , вообще говоря, не ограничена энергетической поверхностью, т.е. для нее  $\mathbf{k}^2 + m^2$  не обязательно равно  $E^2$ ), может быть записана в виде [12]

$$T^{\text{off}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = (\psi_0(\mathbf{k}), \hat{T}^{\text{off}}(E)\psi_0(\mathbf{k}')), \quad (42)$$

где оператор перехода  $\hat{T}^{\text{off}}(E)$  определен операторным уравнением [11]

$$\hat{T}^{\text{off}} = \hat{U} - \hat{U}\hat{G}_0\hat{T}^{\text{off}}. \quad (43)$$

Здесь  $\hat{G}_0 = \hat{H}_0^{-1}$  — оператор, обратный гамильтониану в отсутствие возмущения. Все сомножители в формуле (42) определены, вообще говоря, при разных энергиях:  $E$ ,  $E(\mathbf{k})$  и  $E(\mathbf{k}')$ . Запишем уравнение Липпмана–Швингера (43) для однопримесной  $T$ -матрицы в матричном виде

$$T^{\text{off}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \int d^2q U(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \frac{\gamma_\mu q_\mu + m - \gamma_0 E}{\mathbf{q}^2 + m^2 - E^2 + i0} T^{\text{off}}(\mathbf{q}, \mathbf{k}', E), \quad (44)$$

где преобразование Фурье для потенциала возмущения определено следующим образом:

$$U(\mathbf{k} - \mathbf{k}') = \int d^2r \exp[-i(\mathbf{k} - \mathbf{k}')\mathbf{r}]U(r) = 2\pi \sum_m \epsilon_m \cos m\theta \int_0^\infty dr r J_m(kr)U(r)J_m(k'r), \quad (45)$$

$$\epsilon_m = \begin{cases} 1 & \text{при } m = 0, \\ 2 & \text{при } m \neq 0. \end{cases} \quad (46)$$

Здесь  $\gamma_\mu = \beta\alpha_\mu$ ,  $\gamma_0 = \beta$ ,  $\theta$  — угол между векторами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ .

Рассмотрим теперь возможность использования полученных здесь формул для вычисления наблюдаемых в монослойном графене. Как видно из (45),  $U(\mathbf{q})$  является медленно меняющейся функцией волнового вектора в случае короткодействующего возмущения. Тогда  $T$ -матрица, определенная вне энергетической поверхности согласно уравнению Липпмана–Швингера (44), есть также медленно меняющаяся функция от  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ . В то же время она может быть острой функцией энергии  $E$  в окрестности резонанса. Следовательно, в случае узкого резонанса наиболее важная информация о рассеянии содержится в  $T$ -матрице, определенной на энергетической поверхности, которая выражается через  $S$ -матрицу (см. (41))

$$T^{\text{off}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) \simeq T^{\text{on}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', E) = 2i \sum_j \epsilon_{j-1/2} \cos[(j - 1/2)\theta] \{S_j(E) - 1\}. \quad (47)$$

Приближенная формула для однопримесной  $T$ -матрицы в импульсном представлении, определенной вне энергетической поверхности, может быть получена с использованием найденных выше формул для  $S$ -матрицы (27) или (17). Подставив  $S$ -матрицу в представлении углового момента (31) в уравнение (47), получим выражение для  $T$ -матрицы, которое может быть использовано для вычисления таких наблюдаемых, как например плотность состояний или локальная плотность состояний. Фазы рассеяния  $\delta_j(E)$  полностью определены формулами (33), (34) и (32). Электронная плотность состояний и другие наблюдаемые для систем с неперекрывающимися примесными потенциалами могут быть рассчитаны с использованием формулы Ллойда [13]. Простейшее приближение может быть получено путем вычисления массового оператора  $M(\mathbf{k}, E)$  в низшем порядке по концентрации примесей  $n$ , используя метод средней  $T$ -матрицы для случайного распределения примесей [14]

$$M(\mathbf{k}, E) = n \langle \mathbf{k} | T^{\text{off}}(E) | \mathbf{k} \rangle. \quad (48)$$

Таким образом, имея полученные выше формулы для данных рассеяния, можно рассчитать усредненные по статистическому распределению примесей функции Грина, плотность состояний и коэффициент оптического поглощения. Результаты таких вычислений будут опубликованы позднее.

## 5. Заключение

Мы рассмотрели проблему рассеяния электронов проводимости в монослойном графене с короткодействующими примесями. Возможная асимметрия примесного потенциала по зонному индексу учтена эквивалентным введением симметричного по зонам потенциального возмущения и локального возмущения массы (щели). Возмущение короткодействующей примесью моделируется

кольцеобразной ямой. Получены и проанализированы точные явные формулы для однопримесной  $S$ -матрицы и других данных рассеяния. Получено характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний в поле короткодействующей примеси. Показано, что это уравнение может быть записано в форме условия ортогональности некоторых 2-векторов. Рассмотрено возможное применение полученных результатов для описания кинетических и оптических свойств графена. Предложена процедура приближенного вычисления наблюдаемых, основанная на замене точной  $T$ -матрицы в окрестности острого резонанса, определенной как на, так и вне энергетической поверхности, на однопримесную  $T$ -матрицу, которая определена только на энергетической поверхности. Последняя может быть выражена через точную  $S$ -матрицу. В качестве примера применения указанного подхода мы рассмотрели приближенное вычисление массового оператора электронов графена с неперекрывающимися примесями.

## Список литературы

- [1] D.M. Basko. Phys. Rev. B **78**, 115 432 (2008).
- [2] D.S. Novikov. Phys. Rev. B **76**, 245 435 (2007).
- [3] A. Matulis, F.M. Peeters. Phys. Rev. B **77**, 115 423 (2008).
- [4] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov, Ph.A. Pogorelov. Phys. Lett. A **373**, 525 (2009).
- [5] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov. Phys. Lett. A **374**, 1270 (2010).
- [6] A. Lherbier, X. Blaze, Y.-M. Niquet, F. Triozon, S. Roche. Phys. Rev. Lett. **101**, 036808-1 (2008).
- [7] S.A. Ktitorov, Chan Siao-sin. ArXiv:0910.3319v1 [cond-mat.mes-hall] (2009).
- [8] С.А. Ктиторов, Чэнь Сяосин. Письма в ЖТФ **36**, 90 (2010).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Наука, М. (1989).
- [10] S. Adam, P.W. Brower, S. Das Sarma. ArXiv: 9811.0609v2 [cond-mat.mes-hall] (2009).
- [11] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Наука, М. (1971).
- [12] R.G. Newton. Теория рассеяния волн и частиц. Мир, М. (1969).
- [13] P. Yakibchuk, O. Volkov, S. Vakarchuk. Cond. Matter Phys. **10**, 249 (2007).
- [14] P.J. Elliot, J.A. Krumhansl, P.L. Leath. Rev. Mod. Phys. **46**, 465 (1974).