Электронные состояния в однослойном графене с короткодействующими дефектами. Сепарабельный в импульсном представлении потенциал

© С.А. Ктиторов[¶], Ю.И. Кузьмин, Н.Е. Фирсова*[¶¶]

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
* Институт проблем машиноведения Российской академии наук,
199178 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 13 января 2011 г. Принята к печати 16 февраля 2011 г.)

Изучены элекронные состояния в монослойном графене с короткодействующими дефектами. Рассмотрен модельный потенциал, сосредоточенный на окружности и асимметричный по зонному индексу. Исследование выполнено для $(2+1)$-мерного уравнения Дирака с потенциалом, сепарабельным в представлении углового момента. Полученное в данной работе характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний сравнивается с полученным нами ранее другим методом уравнением для того же случая. Использованное здесь импульсное представление позволило удовлетворительно регуляризовать эту некорректную по Адамару задачу с сингулярным потенциалом. Развитый метод применен к регуляризации полученных ранее формул для данных рассеяния и проводимости графена.

1. Введение

В течение последних нескольких лет исследование электронного спектра графена привлекало большое внимание исследователей (см., например, обзор [1]). Точечные дефекты были рассмотрены в работах [2–4]. В наших работах [5,6] была предложена новая модель, принимающая во внимание асимметрию матричных элементов потенциала дефекта по зонному индексу. Это означает, что возмущение в общем случае описывается некоторой эрмитовой матрицей. Мы используем представление, в котором эта матрица диагональна. Междолинные переходы не учитываются (см. далее). Задача об электронных состояниях в монослойном графене в присутствии потенциала точечного дефекта, сосредоточенного на окружности, была рассмотрена нами в [5,6]. При этом мы столкнулись со следующей проблемой. Сингулярный характер использованного нами модельного потенциала привел нас к проблеме корректности поставленной задачи, что является специфическим свойством δ-функционного потенциала в уравнении Дирака. Несмотря на этот очевидный недостаток, δ-функционный потенциал чрезвычайно популярен в задачах кинетики ввиду формальной простоты и минимального количества параметров. Поэтому эта проблема заслуживает детального анализа. Использованный в [5,6] подход привел к появлению множества решений, среди которых, вероятно, имеются фантомные. Поэтому возникла необходимость применения некой схемы регуляризации, которая исключает эти фантомные решения.

Настоящая работа посвящена проблеме построения методики, позволяющей получать корректные результаты для монослойного графена при использовании сингулярного потенциала. Найденное здесь характеристическое уравнение для связанных и резонансных состояний сравнивается с полученным нами ранее другим методом уравнением для той же задачи. Проведена регуляризация полученных ранее формул для амплитуды рассеяния и времени релаксации. Сделан вывод, что примененный в данной статье метод регуляризации приводит к корректной постановке задачи. В частности, спектр главным образом зависит от вариации условий сшивания.

Теория процессов переноса при наличии резонансного рассеяния и теория оптического поглощения в графене требуют непертурбативного подхода к анализу электронных состояний в присутствии дефектов. Это делает необходимым рассмотрение точно решаемых моделей дефектов. Одна из таких моделей в монослойном графене — потенциал в виде δ-функции, сосредоточенной на окружности. В работе [7] рассмотрена двухзонная квазирелятивистская проблема связанных и резонансных состояний, описываемых уравнением Дирака в случае трехмерного узкощелевого и бесщелевого полупроводников с таким дефектом. При этом была использована δ-функционная модель. Важно, что этот потенциал не имеет сингулярности при $r = 0$ и он является сепарабельным в представлении углового момента. В настоящей работе мы развиваем этот подход применительно к электронным состояниям монослойного графена. Мы учитываем возможную асимметрию матричных элементов потенциала дефекта по зонным индексам благодаря локальному нарушению симметрии подрешеток, что эквивалентно введению локального возмущения потенциала и массы. Цель данной работы состоит в регуляризации данной некорректной по Адамару задачи. Разработанная методика применена к регуляризации формул для проводимости графена.

[¶] E-mail: ktitorov@mail.ioffe.ru
[¶¶] E-mail: nef2@mail.ru

2. Постановка задачи в импульсном предствлении в случае сепарабельного потенциала

Уравнение Дирака, описывающее электронные состояния в графене, имеет вид

$$\left[-i\hbar v_{\mathrm{F}}\sum_{\mu=1}^{2}\gamma_\mu\partial_\mu-\gamma_0(m+\delta m)v_{\mathrm{F}}^2\right]\psi=(E-V)\psi, \qquad (1)$$

где v_{F} — фермиевская скорость зонных электронов, γ_μ — матрицы Дирака,

$$\gamma_0=\sigma_3, \quad \gamma_1=\sigma_1, \quad \gamma_2=i\sigma_2,$$

σ_i — матрицы Паули, $2mv_{\mathrm{F}}^2=E_g$ — запрещенная зона, $\psi(\mathbf{r})$ — двухкомпонентный спинор,

$$\psi(\mathbf{r})=\begin{pmatrix} f(\mathbf{r})\\ g(\mathbf{r})\end{pmatrix}. \qquad (2)$$

Щель в электронном спектре графена может возникнуть, например, благодаря взаимному сдвигу подрешеток под влиянием подложки [8]. Спинорная структура учитывает двухподрешеточную структуру графена. В (1) $\delta m(\mathbf{r})$ и $V(\mathbf{r})$ — локальные возмущения массы (щели) и потенциала. Локальное возмущение массы может быть индуцировано дефектом в пленке графена или на поверхности подложки [8]. Мы рассматриваем здесь δ-функционную модель дефекта:

$$\delta m(\mathbf{r})=-b\delta(r-r_0), \quad V(\mathbf{r})=-a\delta(r-r_0), \qquad (3)$$

где r и r_0 — радиальная координата и радиус возмущения соответственно. Такое короткодействующее возмущение было использовано для решения проблемы связанных и резонансных состояний для узкощелевого и бесщелевого трехмерных полупроводников в работе [7]. Иногда оказывается более удобно вместо массового и потенциального возмущений вводить асимметричный по зонам потенциал

$$\operatorname{diag}(V_1,V_2), \qquad (4)$$

где

$$V_1=V_1^0\delta(r-r_0), \quad V_2=V_2^0\delta(r-r_0). \qquad (5)$$

Компоненты этого потенциала следующим образом связаны с параметрами a, b:

$$-V_1^0=a+b, \quad -V_2^0=a-b. \qquad (6)$$

Возмущение в виде δ-функций — это простая модель короткодействующего дефекта. Конечный радиус r_0 способствует регуляризации поставленной задачи. Проблема в том, что δ-функционный потенциал делает дираковскую задачу некорректной по Адамару [9]. Это значит, в частности, что результаты могут зависеть от порядка предельных переходов. Конечность радиуса r_0 позволяет также исключить глубокие состояния, нефизические в континуальном приближении. Конечный радиус r_0 приводит к появлению форм-фактора потенциала в импульсном представлении, который делает неэффективными процессы рассеяния с передачей большого квазиимпульса порядка расстояния между точками K и K' в зоне Бриллюэна и, следовательно, к возможности пренебречь междолинными переходами [7].

Введем двумерное преобразование Фурье двухкомпонентной волновой функции (2)

$$f(\mathbf{r})=\int\frac{dp_xdp_y}{(2\pi)^2}e^{i\mathbf{kr}}f_{\mathbf{p}}, \quad g(\mathbf{r})=\int\frac{d^2p}{(2\pi)^2}e^{i\mathbf{kr}}g_{\mathbf{p}}, \qquad (7)$$

где компоненты Фурье $f_{\mathbf{p}}$ и $g_{\mathbf{p}}$ определены обратным преобразованием:

$$f_{\mathbf{p}}=\int dxdye^{-i\mathbf{kr}}f(\mathbf{r}), \quad g_{\mathbf{p}}=\int dxdye^{-i\mathbf{kr}}g(\mathbf{r}). \qquad (8)$$

Обратное преобразование Фурье может быть представлено в виде комбинации преобразования Ханкеля и ряда Фурье по угловой переменной [10]:

$$f_{\mathrm{p}}\equiv f(p,\theta)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^ne^{in\theta}f_n(p),$$

$$g_{\mathrm{p}}\equiv g(p,\theta)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^ne^{in\theta}g_n(p), \qquad (9)$$

$$f_n(p)=\int_0^\infty dr\,rf_n(r)J_n(pr),$$

$$g_n(p)=\int_0^\infty dr\,rg_n(r)J_n(pr), \qquad (10)$$

где $f_n(r)$ — угловая компонента Фурье,

$$f(r,\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}f_n(r)e^{in\theta},$$

$$g(r,\theta)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\sum_{n=-\infty}^{\infty}g_n(r)e^{in\theta}. \qquad (11)$$

Переходя к преобразованию Фурье уравнения Дирака (1), мы предварительно рассмотрим два слагаемых, требующих особенного внимания. Градиентные члены имеют вид

$$-i(\hat\sigma_x\partial_x+\hat\sigma_y\partial_y)\psi(\mathbf{r})=\begin{pmatrix}(\hat p_x+i\hat p_y)g(\mathbf{r})\\(\hat p_x-i\hat p_y)f(\mathbf{r})\end{pmatrix}. \qquad (12)$$

Следовательно, градиентные члены для верхней и нижней компонент спинора принимают в импульсном представлении вид

$$\begin{pmatrix}(p_x+ip_y)g(\mathbf{p})\\(p_x-ip_y)f(\mathbf{p})\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}pe^{i\theta}g(p,\theta)\\pe^{-i\theta}f(p,\theta)\end{pmatrix}. \qquad (13)$$

Подставив (9) в (13), мы получаем

$$\begin{pmatrix}+i\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^ne^{in\theta}g_{n+1}(p)\\-i\sum_{n=-\infty}^{\infty}i^ne^{in\theta}f_{n-1}(p)\end{pmatrix}. \qquad (14)$$

Преобразование Фурье $V_i(\mathbf{p})$ потенциала с круговой симметрией может быть разложено в ряд:

$$V_i(|\mathbf{p}-\mathbf{p}'|) = \pi \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\theta} V_i^n(p, p'), \tag{15}$$

$$V_i^n(p, p') = \int_0^\infty dr\, r J_n(pr) V_i(r) J_n(p'r), \tag{16}$$

где $J_n(pr)$ — функция Бесселя, $i = 1, 2$. Таким образом, мы получаем систему интегральных уравнений

$$(E-m) f_j(p) + ipg_j(p) - \int dp' p' f_j(p') V_1^j(p', p) = 0, \tag{17}$$

$$(E+m) g_j(p) - ipf_j(p) - \int dp' p' g_j(p') V_2^j(p', p) = 0. \tag{18}$$

Мы положили $n = j - 1/2$, где j — квантовое число псевдоспина, $j = \pm 1/2, \pm 3/2 \ldots$ В отличие от релятивистской теории это квантовое число не имеет ничего общего со спином и характеризует вырождение в дираковской точке. Эти уравнения имеют симметрию:

$$f_j \leftrightarrow g_j, \quad E \to -E, \quad j - 1/2 \to j + 1/2, \quad a \to -a. \tag{19}$$

Симметрия уравнений является отражением двух симметрий, присущих графену: точной симметрии между двумя подрешетками и приближенной симметрии зон (зарядовая симметрия), справедливой в пределе малого отклонения квазиимпульса от дираковской точки.

Потенциалы нулевого радиуса [11] и сепарабельные потенциалы [12] весьма популярны в нерелятивистской теории рассеяния. В то же время уравнение Дирака чрезвычайно чувствительно к сингулярности потенциала [13]. Сингулярность δ-функционного потенциала может быть ослаблена путем задания δ-функции на окружности (5) [7]. Подставляя (5) в (15), мы получаем сепарабельный в представлении углового момента потенциал:

$$V_i^j(p, p') = v_i^j(p) v_i^j(p'), \quad i = 1, 2, \tag{20}$$

где

$$v_1^j(p) = \sqrt{r_0 V_1^0} J_{j-1/2}(pr_0),$$

$$v_2^j(p) = \sqrt{r_0 V_2^0} J_{j+1/2}(pr_0). \tag{21}$$

Конечность радиуса потенциала не означает, что эффективный потенциал сосредоточен в пределах одной элементарной ячейки. Его матричные элементы в представлении Кона–Латтинджера (именно оно соответствует стандартному дираковскому представлению) могут иметь значительно больший радиус. В нашей модели это означает, что справедливо неравенство $r_0 > a$. Из формулы (19) видно, что при выполнении этого неравенства форм-фактор потенциала делает переходы между различными точками Дирака маловероятными.

Уравнения (17), (18) становятся вырожденными и могут быть записаны в следующем виде:

$$(m-E) f_j(p) + pg_j(p) + v_1^j(p) \int_0^\infty dp' p' f_j(p') v_1^j(p') = 0, \tag{22}$$

$$(m-E) f_j(p) + pg_j(p) - v_2^j(p) \int_0^\infty dp' p' g_j(p') v_2^j(p') = 0. \tag{23}$$

3. Регуляризация характеристического уравнения

Введем функции

$$F_j(E) = \int_0^\infty dp'\, p f_j(p) v_1^j(p),$$

$$G_j(E) = \int_0^\infty dp'\, p g_j(p) v_2^j(p),$$

$$R(p) = (p^2 + m^2 - E^2)^{-1}. \tag{24}$$

Тогда мы получаем систему алгебраических уравнений:

$$F_j = G_j \int_0^\infty dp'\, p^2 R(p) v_1^j(p) v_2^j(p) - (E+m) F_j \int_0^\infty dp'\, p R(p) [v_1^j(p)]^2, \tag{25}$$

$$G_j = F_j \int_0^\infty dp'\, p^2 R(p) v_1^j(p) v_2^j(p) + (E-m) G_j \int_0^\infty dp\, p^2 R(p) [v_2^j(p)]^2. \tag{26}$$

Условие разрешимости этой системы приводит нас к характеристическому уравнению, корни которого определяют связанные и резонансные состояния:

$$\left\{1 + (m+E) \int_0^\infty dp\, pR(p) [v_1^j(p)]^2\right\} \times \left\{1 + (m-E) \int_0^\infty dp\, pR(p) [v_2^j(p)]^2\right\} = \left[\int_0^\infty dp\, p^2 R(p) v_1^j(p) v_2^j(p)\right]^2. \tag{27}$$

Используя известную формулу [14]

$$\int_0^\infty dx \frac{x^{\mu-\nu+2n+1}}{x^2+z^2} J_\mu(bx) J_\nu(cx) = (-1)^n z^{\mu-\nu+2n} I_\nu(x) K_\mu(x), \tag{28}$$

мы получаем

$$\left[1+(m+E)V_1^0 I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right] \times \left[1+(m-E)V_2^0 I_{j+1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0)\right] = (m+E)(m-E)I_{j-1/2}^2(\kappa r_0)K_{j+1/2}^2(\kappa r_0), \quad (29)$$

где $\kappa^2=(m^2-E^2)$, $I_n(x)$ и $K_n(x)$ — модифицированные функции Бесселя. Используя тождество [15]

$$I_\nu(x)K_{\nu+1}(x)+I_{\nu+1}(x)K_\nu(x)=1/x, \quad (30)$$

мы получаем характеристическое уравнение

$$\kappa\left[I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0)+I_{j+1/2}(\kappa r_0)K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right] + (m+E)V_1^0 I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j-1/2}(\kappa r_0) + (m-E)V_2^0 I_{j+1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0)=0. \quad (31)$$

Используя соотношения (6), получаем уравнение

$$\kappa\left[I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0)+K_{j-1/2}(\kappa r_0)I_{j+1/2}(\kappa r_0)\right] = \left[(m-E)(a-b)I_{j+1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0) + (a+b)(m+E)I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right]. \quad (32)$$

Сравним это уравнение с полученным нами ранее другим методом [6]

$$p\left[J_{j-1/2}(pr_0)H_{j+1/2}^{(1)}(pr_0)-J_{j+1/2}(pr_0)H_{j-1/2}^{(1)}(pr_0)\right] = T(a,b)\left[\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}\,(a-b)J_{j+1/2}(pr_0)H_{j+1/2}^{(1)}(pr_0) + \sqrt{\frac{E+m}{E-m}}\,(a+b)J_{j-1/2}(pr_0)H_{j-1/2}^{(1)}(r_0)\right], \quad (33)$$

где

$$T(a,b)=\frac{\tan(\sqrt{a^2-b^2})}{\sqrt{a^2-b^2}}, \quad (34)$$

$H_n^{(1)}(z)$ — функция Ханкеля, $p=\sqrt{E^2-m^2}$. Выполнив аналитическое продолжение от случая зонных состояний с $E^2>m^2$ к противоположному случаю связанных с $E^2<m^2$, мы получаем уравнение

$$\kappa\left[I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0)+K_{j-1/2}(\kappa r_0)I_{j+1/2}(\kappa r_0)\right] = T(a,b)\left[m-E(a-b)I_{j+1/2}(\kappa r_0)K_{j+1/2}(\kappa r_0) + (a+b)(m+E)I_{j-1/2}(\kappa r_0)K_{j-1/2}(\kappa r_0)\right]. \quad (35)$$

Мы видим, что единственное различие между формулами (32) и (35) состоит в присутствии множителя (34) в уравнении, полученном в [6]. Эти уравнения практически идентичны в пределе

$$a^2-b^2\to 0, \quad T(a,b)\to 1. \quad (36)$$

Этот предел может быть достигнут на линии $a^2-b^2=0$ или когда a и b малы. Причина различия этих уравнений состоит в следующем. В уравнении Дирака δ-функционный потенциал порождает граничную задачу, некорректную по Адамару [9]. Такая проблема нуждается в регуляризации. При этом в настоящей работе и в работе [6] использовались разные подходы. В работе [6] сохранялась сингулярность возмущения и для регуляризации использовалась специальная схема сшивания решений, в то время как в настоящей работе регуляризация достигалась за счет сглаживающего свойства преобразования Фурье. В частности, потенциал принял сепарабельный вид с нелокальным ядром $v_i^l(p)=\sqrt{r_0V_i^0}J_{l+1/2}(pr_0)$ (см. формулу (21)). Именно эта нелокальность играет центральную роль в регуляризации. Уравнения (32) и (35) имеют асимптотически совпадающие решения, когда справедливо (36). В то же время множества их решений совершенно различны вне этой области параметров a и b. Более того, уравнение (35) имеет значительно более богатое множество решений, чем уравнение (32) [6], благодаря периодичности тангенса, присутствующего в (34). Мы приходим к заключению, что более богатое множество решений уравнения (35) является артефактом модели точечного взаимодействия. Наконец, модель кольцевой ямы, исследованная в [16], не воспроизводит это богатое множество решений даже в пределе нулевой ширины кольца и бесконечной глубины ямы. Следовательно, уравнение, полученное в настоящей работе, можно рассматривать как решение корректно регуляризованной граничной задачи.

4. Регуляризованные матрица рассеяния и время релаксации

Развитый выше подход может быть применен к регуляризации задачи рассеяния на точечном дефекте в графене. Наша цель — скорректировать полученные ранее [6] формулы для данных рассеяния в этом случае с помощью проведенной выше регуляризации. Определив элемент матрицы рассеяния как отношение амплитуд расходящейся и сходящейся цилиндрических волн решений интегральных уравнений (17), (18), мы получаем

$$S_j(E)=-\frac{\mathscr{F}_j^{(2)}}{\mathscr{F}_j^{(1)}}, \quad (37)$$

где функции $\mathscr{F}_j^{(\alpha)}$ определены формулой

$$\mathscr{F}_j^{(\alpha)}=-\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}(a-b)J_{j+1/2}(pr_0)H_{j+1/2}^{(\alpha)}(pr_0) - \sqrt{\frac{E+m}{E-m}}(a+b)J_{j-1/2}(pr_0)H_{j-1/2}^{(\alpha)}(pr_0) + p\left[J_{j-1/2}(pr_0)H_{j+1/2}^{(\alpha)}(pr_0)-J_{j+1/2}(pr_0)H_{j-1/2}^{(\alpha)}(pr_0)\right]. \quad (38)$$

Эти функции отличаются от полученных ранее [6]

$$\mathscr{F}_j^{(\alpha)} = -T(a,b)\Bigg[\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}(a-b)J_{j+1/2}(pr_0)H^{(\alpha)}_{j+1/2}(pr_0)$$
$$+\sqrt{\frac{E+m}{E-m}}(a+b)J_{j-1/2}(pr_0)H^{(\alpha)}_{j-1/2}(pr_0)\Bigg]$$
$$+p\big[J_{j-1/2}(pr_0)H^{(\alpha)}_{j+1/2}(pr_0)-J_{j+1/2}(pr_0)H^{(\alpha)}_{j-1/2}(pr_0)\big] \tag{39}$$

отсутствием у регуляризованного выражения множителя $T(a,b)$ (34). Используя известные формулы для функций Ханкеля $H_n^{(1)}(z)=J_n+iN_n$, $H_n^{(2)}=J_n-iN_n$, мы можем записать регуляризованную S-матрицу в виде

$$S_j(E) = -\frac{A_j(E)-iB_j(E)}{A_j(E)+iB_j(E)} = \frac{B_j(E)+iA_j(E)}{B_j(E)-iF_j(E)}, \tag{40}$$

и, следовательно, она может быть представлена в стандартном виде [17]

$$S_j(E)=\exp[i2\delta_j(E)], \tag{41}$$

где фаза рассеяния определена выражением

$$\delta_j(E)=\arctan\frac{A_j(E)}{B_j(E)}. \tag{42}$$

Формулы (40), (41) показывают, что полученная регуляризованная S-матрица унитарна. Функции $A_j(E)$ и $B_j(E)$ имеют вид

$$A_j(E)=(a+b)\sqrt{\frac{E+m}{E-m}}J^2_{j-1/2}(pr_0)$$
$$+(a-b)\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}J^2_{j+1/2}(pr_0), \tag{43}$$

$$B_j(E)=(a+b)\sqrt{\frac{E+m}{E-m}}J_{j-1/2}(pr_0)N_{j-1/2}(pr_0)$$
$$+(a-b)\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}J_{j+1/2}(pr_0)N_{j+1/2}(pr_0)$$
$$+p\big[J_{j-1/2}(pr_0)N_{j+1/2}(pr_0)-J_{j+1/2}(pr_0)N_{j-1/2}(pr_0)\big]. \tag{44}$$

Используя разложение функций Бесселя [18]

$$J_n(x)\sim(1/n!)(x/2)^n, \tag{45}$$

$$N_n(x)\sim\begin{cases}-[\Gamma(n)/\pi](2/x)^n & \text{при } n>0,\\ (2\pi)\ln(\gamma_{\mathrm{E}}x/2) & \text{при } n=0,\end{cases} \tag{46}$$

мы приходим к выводу, что для низкоэнергетического рассеяния на короткодействующем потенциале $pr_0\ll 1$, фаза $\delta_j(E)$ мала как $(pr_0)^{|j|+1/2}$, кроме случая $j=\pm1/2$. Здесь $\ln\gamma_{\mathrm{E}}$ — постоянная Эйлера. В случае малых радиуса r_0 и энергии E мы можем пренебречь всеми высшими парциальными волнами, учитывая лишь фазу δ_j для $j=\pm1/2$:

$$\tan\delta_{1/2}(E)=\sqrt{\frac{E+m}{E-m}}(a+b)\pi\left(\frac{pr_0}{2}\right),\quad pr_0\to0, \tag{47}$$

$$\tan\delta_{-1/2}(E)\approx-\sqrt{\frac{E-m}{E+m}}(a-b)\pi\left(\frac{pr_0}{2}\right),\quad pr_0\to0. \tag{48}$$

Таким образом, фаза пропорциональна pr_0 в длинноволновом пределе в соответствии с общими принципами квантовой механики [3,17]. Амплитуду рассеяния $f(\theta)$ и транспортное сечение рассеяния Σ_{tr} можно следующим образом выразить через $S_j(E)$ [3]:

$$f(\theta)=\frac{1}{i\sqrt{2\pi p}}\sum_{j=\pm1/2,\pm3/2,\ldots}[S_j(E)-1]\exp[i(j-1/2)\theta], \tag{49}$$

$$\Sigma_{\mathrm{tr}}=2/p\sum_{j=\pm1/2,\pm3/2,\ldots}\sin^2(\delta_{j+1}-\delta_j). \tag{50}$$

Вблизи резонанса выражение для фазы принимает брейт-вигнеровскую форму [17]: $\delta_j\approx\delta_j^{(0)}+\arctan\frac{\Gamma_j}{2(E_j^{(0)}-E)}$, где $E_j^{(0)}$ и Γ_j — положение и ширина резонансного уровня соответственно, $\delta_j^{(0)}$ — медленно меняющаяся фаза потенциального (фонового) рассеяния.

Представленные выше формулы могут быть использованы для вычисления больцмановской проводимости (см. [19])

$$\sigma=\left(\frac{e^2}{2\pi\hbar}\right)\frac{2E_{\mathrm{F}}}{\hbar}\tau_{\mathrm{tr}}, \tag{51}$$

где транспортное время релаксации τ_{tr} дано формулой

$$1/\tau_{\mathrm{tr}}=N_i\upsilon_{\mathrm{F}}\Sigma_{\mathrm{tr}}. \tag{52}$$

Здесь N_i — концентрация примесей на единицу площади, $E_{\mathrm{F}}=\upsilon_{\mathrm{F}}\kappa_{\mathrm{F}}$. Приведенные выше уравнения преобразуют зависимость данных рассеяния от энергии Ферми и параметров рассеивателей a, b в соответствующую зависимость больцмановской проводимости. Таким образом, развитый здесь подход позволяет изучать влияние специфических особенностей данных рассеяния электронов в графене на поведение электрической проводимости.

5. Заключение

Показано, что метод преобразования Фурье для уравнения Дирака с несимметричным по зонам δ-функционным потенциалом дефекта приводит к регуляризованной задаче, в которой отсутствуют фантомные дополнительные решения, являющиеся артефактом сингулярного потенциала. Этот подход регуляризует некорректную по Адамару задачу. Разработанный метод применен к регуляризации ранее полученных формул для данных рассеяния и проводимости.

Список литературы

[1] A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim. arXiv: 0709.1163 (2008).
[2] D.M. Basko. Phys. Rev. B, **78**, 115 432 (2008).
[3] D.S. Novikov. Phys. Rev. B, **76**, 245 435 (2007).
[4] A. Matulis, F.M. Peeters. Phys. Rev. B, **77**, 115 423 (2008).
[5] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov, P.A. Pogorelov. Phys. Lett. A, 373 525 (2009).
[6] N.E. Firsova, S.A. Ktitorov. Phys. Lett. A, **374**, 1270 (2010).
[7] V.I. Tamarchenko, S.A. Ktitorov. ФТТ, **19**, 2970 (1977).
[8] A. Lherbier, X. Blaze, Y.-M. Niquet, F. Triozon, S. Roche. Phys. Rev. Lett., **101**, 036 808 (2008).
[9] L.E. Payne. In: *Lecture Notes in Mathematics*, v. 316 [*Symposium on Non-Well-Posed Problems and Logarithmic Convexity*], ed. by A. Dold and B. Eckmann (Edinburg, 1972).
[10] Ф.М. Морс, Г. Фешбах. *Методы теоретической физики*, т. II (М., Иностр. лит., 1960).
[11] Ю.Н. Демков, В.Н. Островский. *Потенциалы нулевого радиуса в атомной физике* (Л., Изд-во Ленингр. ун-та, 1975).
[12] R.G. Newton. *Scattering theory of waves and particles* (Springer–Verlag, N.Y., 1982).
[13] Я.Б. Зельдович. В.С. Попов. УФН, **14**, 673 (1972).
[14] А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев. *Интегралы и ряды. Специальные функции* (М., Наука, 1983).
[15] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений* (М., Физматгиз, 1963).
[16] С.А. Ктиторов, Н.Е. Фирсова. ФТТ, **53**, 376 (2011).
[17] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1989).
[18] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовица, И. Стигана (М., Наука, 1979).
[19] S. Adam, P.W. Brower, S. Das Sarma. arXive: 9811.0609v2 [cond–mat.mes–hall] (2009).

Редактор Л.В. Шаронова

Electronic states in monolayer graphene with short-range defects. Separable in the momentum representation potential

*S.A. Ktitiriv, Yu.I. Kuzmin, N.E. Firsova**

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia
* Institute for Problems of Mechanical Engineering,
Russian Academy of Sciences,
199178 St. Petersburg, Russia

Abstract The electronic states in the monolayer graphene with the short-range perturbation asymmetric with respect to the band index are analyzed. The study is made for the separable in the angular momentum representation potential basing on the $(2+1)$-dimensional Dirac equation. The characteristic equation for bound and resonance states obtained in the present paper is compared with one derived earlier for the same problem with different approach. The momentum representation approach used in the present paper allowed us to obtain a satisfactory regularization of the Hadamar-incorrect boundary problem stemming from the potential singularity.