

Министерство образования и науки Российской Федерации

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования «Московский физико-технический
институт (государственный университет)»

Выпускная квалификационная работа на степень бакалавра

"Изучение примесных состояний в соединениях с
нетривиальным одночастичным спектром"

Студент 128 гр. Билинский Ю.М.

Научный руководитель:
Арсеев П.И.
*член-корреспондент,
доктор физ.-мат. наук*

Москва, 2015 г.

Изучение примесных состояний в соединениях с нетривиальным одночастичным спектром

научный руководитель: Арсеев Пётр Иварович
студент: Билинский Юрий

Аннотация

В данной работе рассматривается задача о связанных одноэлектронных состояниях в кулоновском поле примеси, помещенной в решетку графена. Обсуждаются два предельных случая для этой задачи – случай, в котором можно применить континуальное приближение, и тот, когда возможно применить приближение потенциала, действующего на небольшом количестве узлов.

1 Введение

Известно, что графен образуют гексагональную двумерную решетку, в элементарной ячейке которой содержится два полных атома углерода. Кроме того, одночастичный спектр в графене интересен для изучения, поскольку в нем две электронные зоны касаются, причем спектр в области, близкой к точке касания, имеет линейный характер, в результате чего электроны в определенных условиях ведут себя как безмассовые заряженные частицы. Это приводит к интересным свойствам данного вещества с точки зрения теоретической и экспериментальной физики, а также технологии (см. [1, 2]).

Одна из интересных задач о графене состоит в том, чтобы найти связанные электронные состояния в потенциале примеси. Важным частным случаем примесного потенциала является кулоновский потенциал. Будет проведен достаточно полный анализ этой задачи для различных предельных случаев и частей спектра.

Мы будем действовать в пределах модели сильно связанных электронов в решетке. Кроме того, будем учитывать перескок электронов между

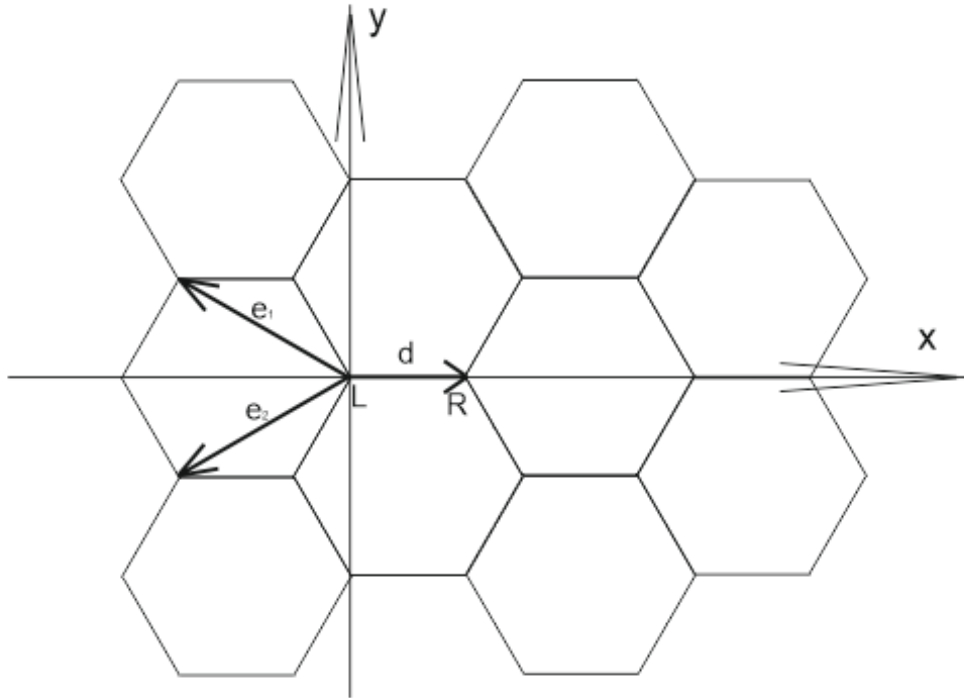


Рис. 1: Решетка графена

различными атомами только в том случае, если они являются ближайшими соседями друг друга.

2 Общий формализм для графена

2.1 Общие положения. Гамильтониан беспримесной задачи. Функции Грина в беспримесной решетке

Кристаллическая решетка графена, как уже было сказано выше, является гексагональной и содержит по два атома в элементарной ячейке. Из соображений удобства мы укажем в начале работы систему координат, в которой будем работать, и другие основные обозначения.

Назовем атомы, эквивалентные помещенному в начало координат, левыми (L), а неэквивалентные – правыми (R). Тогда векторы $\mathbf{e}_1 = (-3a/2, \sqrt{3}a/2)^T$, $\mathbf{e}_2 = (-3a/2, -\sqrt{3}a/2)^T$ соединяют два узла решетки, а $\mathbf{d} = (a, 0)^T$ указывает из левого атома на правый. Отсюда площадь

элементарной ячейки $V = 3a^2\sqrt{3}/2$. Кроме того, для будущего изучения методом сильно связанных электронов важно указать все векторы, указывающие на ближайших соседей произвольного левого атома:

$$\delta_1^{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}a \\ \frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix}, \quad \delta_2^{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}a \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}a \end{pmatrix}, \quad \delta_3^{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1)$$

На ближайших соседей правого атома указывают векторы, противоположные указанным выше.

Теперь мы готовы перейти от геометрии задачи к ее физике.

Гамильтониан в узельном представлении в приближении сильной связи и ближайших соседей записывается в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_t, \quad (2)$$

$$\hat{H}_a = \sum_{\mathbf{n}} \varepsilon^{(0)} (\hat{l}_{\mathbf{n}}^+ \hat{l}_{\mathbf{n}} + \hat{r}_{\mathbf{n}}^+ \hat{r}_{\mathbf{n}}), \quad (3)$$

$$\hat{H}_t = -t \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} (\hat{l}_{\mathbf{m}}^+ \hat{r}_{\mathbf{n}} + \hat{r}_{\mathbf{n}}^+ \hat{l}_{\mathbf{m}}). \quad (4)$$

Здесь первое слагаемое в гамильтониане соответствует энергии электронов атомах решетки, а второй – тунелированию электронов между атомами. В первой части суммирование ведется по всем узлам системы, а во второй – по всем парам ближайших соседей. $\varepsilon^{(0)}$, t – энергия электронов на атомах, отсчитываемая от химического потенциала, и интеграл перекрытия, $\hat{l}_{\mathbf{n}}$, $\hat{r}_{\mathbf{n}}$ – операторы уничтожения электронов на левом и правом атоме в ячейке \mathbf{n} соответственно. Вывод этого соотношения приведен в [4].

Для такого Гамильтониана можно написать запаздывающую функцию Грина $G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega)$ (сверху указываем тип атома, а внизу – узел) и, если считать (4) возмущением, записать для нее уравнение Дайсона (см. [3]) в виде

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega) = \frac{\delta_{\mathbf{n},\mathbf{m}}\delta^{\alpha\beta}}{\omega - \varepsilon^{(0)}} + \frac{1}{\omega - \varepsilon^{(0)}} \sum_{\mathbf{p},\gamma} F_{\mathbf{n},\mathbf{p}}^{\alpha\beta} G_{\mathbf{pm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega). \quad (5)$$

Здесь $F_{\mathbf{n},\mathbf{p}}^{\alpha\beta}$ обозначает функцию, равную $-t$ для ближайших соседей и 0 в противном случае.

Это уравнение существенно упрощается с помощью преобразования Фурье:

$$\tilde{G}_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}^{(0)\alpha\beta}(\omega) = \sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} e^{i(\mathbf{w}\mathbf{r}_{\mathbf{n}}^\alpha - \mathbf{w}'\mathbf{r}_{\mathbf{m}}^\beta)} G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega), \quad (6)$$

$$(\omega - \varepsilon^{(0)})\tilde{G}_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}^{(0)\alpha\beta}(\omega) + R_{\alpha,\mathbf{w}}\tilde{G}_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}^{(0)\bar{\alpha}\beta}(\omega) = N\delta_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}\delta^{\alpha\beta}. \quad (7)$$

Здесь и далее черта над индексом, обозначающим тип атома, возвращает значение типа, не совпадающее с данным. Кроме того,

$$R_{\alpha, \mathbf{w}} = t \sum_{\nu=1}^3 e^{-i\mathbf{w}\delta_{\nu}^{\alpha}}, \quad (8)$$

и, как легко заметить, $(R_{L, \mathbf{w}})^* = R_{R, \mathbf{w}}$.

Уравнение (7) легко решается, в результате чего получается

$$\tilde{G}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}^{(0)\beta\beta} = N\delta_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'} \frac{\omega - \varepsilon^{(0)}}{(\omega - \varepsilon^{(0)})^2 - R_{\beta, \mathbf{w}}R_{\bar{\beta}, \mathbf{w}}}, \quad (9)$$

$$\tilde{G}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}^{(0)\bar{\beta}\beta} = -N\delta_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'} \frac{R_{\bar{\beta}, \mathbf{w}}}{(\omega - \varepsilon^{(0)})^2 - R_{\beta, \mathbf{w}}R_{\bar{\beta}, \mathbf{w}}}. \quad (10)$$

Сейчас имеет смысл сделать несколько упрощений. Во первых, поскольку $\varepsilon^{(0)}$ везде входит в виде разности с ω , мы можем без ограничения общности положить его нулем. С другой стороны, нам удобно обозначить $\varepsilon(\mathbf{w}) = |R_{L, \mathbf{w}}|$. В таком случае, выражения для функций Грина принимают вид

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}(r_{\mathbf{m}}^{\beta} - r_{\mathbf{n}}^{\beta})} \frac{\omega}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}, \quad (11)$$

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\bar{\beta}\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{w}} e^{i\mathbf{w}(r_{\mathbf{m}}^{\beta} - r_{\mathbf{n}}^{\bar{\beta}})} \frac{R_{\bar{\beta}, \mathbf{w}}}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}. \quad (12)$$

Отсюда видим, что функции Грина имеют полюса в точках $\pm\varepsilon(\mathbf{w})$, и физический смысл функции $\varepsilon(\mathbf{w})$ состоит в том, что она является спектром квазичастиц в электронной зоне.

Для перехода к интегрированию по непрерывной зоне сделаем замену

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{w}} \rightarrow V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2}.$$

Тогда выражения для функций Грина переписутся в виде

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta} = V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{w}(r_{\mathbf{m}}^{\beta} - r_{\mathbf{n}}^{\beta})} \frac{\omega}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}, \quad (13)$$

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\bar{\beta}\beta} = V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{w}(r_{\mathbf{m}}^{\beta} - r_{\mathbf{n}}^{\bar{\beta}})} \frac{R_{\bar{\beta}, \mathbf{w}}}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}. \quad (14)$$

По окончании вводной части, полезно написать выражение для спектра системы. Подставляя (1) в (8) и результат в определение $\varepsilon(\mathbf{w})$, в результате несложных вычислений получаем

$$\varepsilon(\mathbf{w}) = t \sqrt{4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a w_y \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a w_y \right) \cos \left(\frac{3}{2} a w_x \right) + 1}. \quad (15)$$

2.2 Задача о примеси

В предыдущем разделе мы нашли выражение для гриновской функции в беспримесной решетке графена. Теперь нам нужно исследовать, как она изменится, когда мы добавим дополнительный потенциал в решетку.

Уравнение Дайсона для примесной задачи можно записать в виде

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega) + \sum_{\gamma, \mathbf{p}} G_{\mathbf{np}}^{(0)\alpha\gamma}(\omega) U_{\mathbf{p}}^{\gamma} G_{\mathbf{pm}}^{\gamma\beta}(\omega). \quad (16)$$

Здесь $U_{\mathbf{p}}^{\gamma}$ обозначает потенциал, усредненный по атомному электронному состоянию. Для узлов, находящихся достаточно далеко от начала координат, можно считать, что $U_{\mathbf{p}}^{\gamma} = -Ze^2/|r_{\mathbf{p}}^{\gamma}|$.

Нахождение решения этой задачи аналитически не представляется возможным. С другой стороны, существуют приближения, которые позволяют в некоторых частных случаях значительно упростить её.

Сначала предположим, что электронное состояние сильно локализовано в пространстве вокруг начала координат. Это значит, что $G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega)$ достаточно быстро спадают с удалением узлов от центра потенциала. В результате, (16) принимает вид

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega) + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega) G_{\mathbf{0m}}^{L\beta}(\omega) U_0 + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R}(\omega) G_{\mathbf{\delta m}}^{R\beta}(\omega) U_1, \quad (17)$$

где U_0, U_1 - значения потенциала на центральном атоме и его ближайших соседях соответственно. Это уравнение значительно проще изначально, поскольку его решение сводится к решению линейной алгебраической системы уравнений. Более подробно это рассматривается в следующем разделе.

Другое приближение возможно в случае, противоположном первому. Прежде чем перейти к нему, сделаем несколько предварительных преобразований. Сначала запишем уравнение (16) в импульсной форме:

$$G_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}(\omega) = G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega) \left(\frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}') + V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}_1}{(2\pi)^2} \tilde{U}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}_1} G_{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}'} \right). \quad (18)$$

Отныне мы будем придерживаться обозначений, что, если функции Грина пишутся без верхних индексов, под ними подразумеваются матрицы два на два, составленные из функций с различными индексами, например,

$$G_{\mathbf{nm}} = \begin{pmatrix} G_{\mathbf{nm}}^{LL} & G_{\mathbf{nm}}^{LR} \\ G_{\mathbf{nm}}^{RL} & G_{\mathbf{nm}}^{RR} \end{pmatrix}.$$

Кроме того,

$$G_{\mathbf{w},\mathbf{w}'} = \sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} G_{\mathbf{nm}} e^{i(\mathbf{w}\mathbf{r}_{\mathbf{n}} - \mathbf{w}'\mathbf{r}_{\mathbf{m}})}, \quad (19)$$

$$G_{\mathbf{nm}} = V^2 \int_{B.Z} \frac{d^2\mathbf{w}d^2\mathbf{w}'}{(2\pi)^4} G_{\mathbf{w},\mathbf{w}'} e^{-i(\mathbf{w}\mathbf{r}_{\mathbf{n}} - \mathbf{w}'\mathbf{r}_{\mathbf{m}})}, \quad (20)$$

$$\tilde{U}_{\mathbf{w},\mathbf{w}_1} = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$$G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega) = \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\omega)} \begin{pmatrix} \omega & -R_{L,\mathbf{w}} e^{i\omega\mathbf{d}} \\ -R_{R,\mathbf{w}} e^{-i\omega\mathbf{d}} & \omega \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Здесь и далее $\mathbf{r}_{\mathbf{n}} \equiv \mathbf{r}_{\mathbf{n}}^L$.

Мы можем переписать (18) немного иначе, если домножим его слева на матрицу, обратную (22), которая равна

$$(G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} = \begin{pmatrix} \omega & R_{L,\mathbf{w}} e^{i\omega\mathbf{d}} \\ R_{R,\mathbf{w}} e^{-i\omega\mathbf{d}} & \omega \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Тогда уравнение (18) примет вид

$$(G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} G_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}(\omega) = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}') + V \int_{B.Z} \frac{d^2\mathbf{w}_1}{(2\pi)^2} \tilde{U}_{\mathbf{w},\mathbf{w}_1} G_{\mathbf{w}_1,\mathbf{w}'}(\omega). \quad (24)$$

Эта форма будет отправной точкой для рассмотрения состояний, слабо локализованных в пространстве. Мы можем надеяться, что, если $G_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}(\omega)$ спадают достаточно быстро при увеличении волновых векторов по абсолютной величине, мы получим, что интегралы по зоне Бриллюэна можно заменить на интегралы по всему импульсному пространству. В пространственном представлении это будет значить, что мы заменим функции, заданные на решетке, непрерывными. В таком случае, уравнение (24) в координатном представлении станет матрично-дифференциальным. Подробнее об этом мы поговорим в разделе 4.

3 Сильно локализованные состояния

В прошлом разделе мы получили уравнение (17) в приближении быстро спадающих на бесконечности функций Грина:

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega) + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega)G_{\mathbf{0m}}^{L\beta}(\omega)U_0 + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R}(\omega)G_{\delta\mathbf{m}}^{R\beta}(\omega)U_1.$$

Теперь мы изучим это уравнение и получим его решения. В первом подразделе мы получим алгебраическую систему, к которой оно сводится, и обсудим методы ее решения. Затем, в следующих двух подразделах, мы получим решения для двух областей энергии: в области, где в невозмущенной системе не было состояний, и там, где они образовывали непрерывный спектр. Кроме того, мы исследуем, как быстро решения спадают в пространстве, и удовлетворяют ли они приближению, в котором были получены.

3.1 Метод решения задачи для сильно локализованных состояний

3.1.1 Некоторые упрощения

Можно заметить, что в правую часть уравнения (17) искомые функции Грина входят только в виде $G_{\mathbf{0m}}^{L\beta}(\omega)$, $G_{\delta\mathbf{m}}^{R\beta}(\omega)$. Относительно них уравнение замкнуто, но содержит параметр \mathbf{m} , что делает его решение неудобным. Можно поступить по-другому, воспользовавшись общим для функций Грина свойством $(G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega))^* = G_{\mathbf{mn}}^{\beta\alpha}(\omega^*)$.

Важные частные случаи уравнения (17) записываются в виде

$$G_{\mathbf{n0}}^{\alpha L}(\omega) = G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega) + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega)G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)U_0 + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R}(\omega)G_{\delta\mathbf{0}}^{RL}(\omega)U_1, \quad (25)$$

$$G_{\mathbf{n\delta}}^{\alpha R}(\omega) = G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R}(\omega) + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega)G_{\mathbf{0\delta}}^{LR}(\omega)U_0 + \sum_{\delta'} G_{\mathbf{n\delta'}}^{(0)\alpha R}(\omega)G_{\delta'\delta}^{RR}(\omega)U_1. \quad (26)$$

Для них в правую часть входят уже только $G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)$, $G_{\delta\mathbf{0}}^{RL}(\omega)$, $G_{\delta'\delta}^{RR}(\omega)$. Относительно них система замыкается, и мы получаем

$$G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega) = G_{\mathbf{00}}^{(0)LL}(\omega) + G_{\mathbf{00}}^{(0)LL}(\omega)G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)U_0 + \sum_{\delta'} G_{\mathbf{0\delta'}}^{(0)LR}(\omega)G_{\delta'\mathbf{0}}^{RL}(\omega)U_1, \quad (27)$$

$$G_{\delta 0}^{RL}(\omega) = G_{\delta 0}^{(0)RL}(\omega) + G_{\delta 0}^{(0)RL}(\omega)G_{00}^{LL}(\omega)U_0 + \sum_{\delta'} G_{\delta\delta'}^{(0)RR}(\omega)G_{\delta'0}^{RL}(\omega)U_1, \quad (28)$$

$$G_{\delta\delta'}^{RR}(\omega) = G_{\delta\delta'}^{(0)RR}(\omega) + G_{\delta 0}^{(0)RL}(\omega)G_{0\delta'}^{LR}(\omega)U_0 + \sum_{\delta''} G_{\delta\delta''}^{(0)RR}(\omega)G_{\delta''\delta'}^{RR}(\omega)U_1. \quad (29)$$

Заметим, что первые два уравнения не содержат функций $G_{\delta'\delta}^{RR}(\omega)$ и сами образуют замкнутую систему. По этой причине, мы сначала забудем о существовании (29) и исследуем два других уравнения отдельно.

Симметричные условия позволяют дальше упростить систему уравнений. Потенциал в задаче сферически симметричен, а решетка должна перейти сама в себя при поворотах на $2\pi/3$. Волновые функции при подобных поворотах не должны меняться по модулю, но могут быть умножены на фазовый множитель, одинаковый для всех точек. При этом, после трех поворотов система обязана вернуться в исходное состояние, и это означает, что фазовый множитель может принимать только значения 1 и $e^{\pm \frac{2i\pi}{3}}$. По аналогии с задачей об этом водорода, назовем первый тип состояний *s*-, а второй – *p*-состояниями.

Кроме всего прочего, это объясняет, почему уравнение (29) отделяется от двух других. Можно заметить, что функции $G_{\delta'\delta}^{RR}(\omega)$ содержит полюса, которых нет у двух других типов функций. Это значит, что существуют состояния, для которых вероятность нахождения электрона в центре равна нулю. Подобные рассуждения позволяют интерпретировать их как *p*-состояния.

Функции Грина же при подобных дискретных поворотах должны переходить сами в себя. Действительно, в силу своей природы эти функции не должны меняться, если все собственные волновые функции будут умножены на фазовые множители, одинаковые для всех точек, но, возможно, различные для разных функций. В том числе, это значит, что функции $G_{\delta 0}^{RL}(\omega)$ одинаковы для различных δ , и система уравнений (27), (28) состоит из всего двух уравнений (опустим аргумент ω для краткости):

$$-G_{00}^{(0)LL} = (U_0 G_{00}^{(0)LL} - 1)G_{00}^{LL} + K_0 U_1 G_{\delta 0}^{RL}, \quad (30)$$

$$-G_{\delta 0}^{(0)RL} = U_0 G_{\delta 0}^{(0)RL} G_{00}^{LL} + (K_1 U_1 - 1)G_{\delta 0}^{RL}. \quad (31)$$

Здесь

$$K_0 = \sum_{\delta} G_{0\delta}^{(0)LR} = 3G_{0\delta}^{(0)LR}, \quad K_1 = \sum_{\delta'} G_{\delta\delta'}^{(0)RR}. \quad (32)$$

Обозначим

$$\Delta = (U_0 G_{\mathbf{00}}^{(0)LL} - 1)(U_0 G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL} - 1) - K_0 U_1 U_0 G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL}, \quad (33)$$

$$\Delta_1 = -G_{\mathbf{00}}^{(0)LL}(K_1 U_1 - 1) + G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL} K_0 U_1, \quad (34)$$

$$\Delta_2 = -(U_0 G_{\mathbf{00}}^{(0)LL} - 1)G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL} + U_0 G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL} G_{\mathbf{00}}^{(0)LL}. \quad (35)$$

Тогда решения уравнения запишутся в виде

$$G_{\mathbf{00}}^{LL} = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad G_{\delta\mathbf{0}}^{RL} = \frac{\Delta_2}{\Delta}. \quad (36)$$

3.1.2 Важные соотношения для беспримесных функций Грина

Полученные результаты можно значительно упростить, если ввести новую функцию

$$\Gamma(\omega) = \frac{G_{\mathbf{00}}^{(0)LL}}{\omega} = V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}. \quad (37)$$

Пользуясь соображениями симметрии, можно показать, что

$$G_{\delta\mathbf{0}}^{(0)RL} = \frac{1}{3t} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)), \quad (38)$$

$$K_1 = -\frac{\omega}{3t} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)), \quad (39)$$

$$K_0 = \frac{1}{t} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)), \quad (40)$$

$$G_{\delta_1 \delta_1}^{(0)RR} = \omega \Gamma(\omega), \quad (41)$$

$$G_{\delta_1 \delta_2}^{(0)RR} = G_{\delta_2 \delta_1}^{(0)RR} = -\frac{\omega}{6t^2} + \frac{1}{2} \omega \Gamma(\omega) \left(\frac{\omega^2}{3t^2} - 1 \right). \quad (42)$$

Отсюда

$$\Delta = \frac{U_1}{3t^2} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)) (\omega - U_0) - U_0 \omega \Gamma(\omega) + 1, \quad (43)$$

$$\Delta_1 = \frac{U_1}{3t^2} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)) + \omega \Gamma(\omega), \quad (44)$$

$$\Delta_2 = \frac{1}{3t} (1 - \omega^2 \Gamma(\omega)). \quad (45)$$

3.1.3 Уравнение на s-состояния

S-состояниям системы соответствуют решения уравнения $\Delta(\omega) = 0$. Это уравнение можно переписать в виде

$$\Gamma(\omega) = \Gamma_1(\omega), \quad (46)$$

где

$$\Gamma_1(\omega) \doteq \frac{\frac{U_1}{3t^2}(\omega - U_0) + 1}{\frac{U_1}{3t^2}\omega^3 + U_0\omega - \frac{U_0U_1}{3t^2}\omega^2} \quad (47)$$

Мы привели уравнение к виду, в котором слева от знака равенства стоит $\Gamma(\omega)$, а справа - рациональное выражение относительно ω . Можно убедиться, что уравнения на спектр для р-состояний тоже запишутся в таком виде. Становится понятно, что для изучения их решений необходимо исследовать аналитические свойства функции $\Gamma(\omega)$.

3.1.4 Уравнения для р-состояний

Вернемся теперь к (29). Переносим величины, которые нам уже известны, вправо, перепишем его как

$$\sum_{\delta'} (\delta_{\delta, \delta'} - G_{\delta\delta'}^{(0)RR} U_1) G_{\delta'\delta''}^{RR} = G_{\delta\delta''}^{(0)RR} + U_0 G_{\delta 0}^{(0)RL} G_{0\delta''}^{LR}. \quad (48)$$

Опуская некоторые вычисления, получаем, что детерминант данной линейной системы равен

$$\gamma_0 = \sum_{\delta'} (\delta_{\delta, \delta'} - G_{\delta\delta'}^{(0)RR} U_1)^3 - 3 \prod_{\delta'} (\delta_{\delta, \delta'} - G_{\delta\delta'}^{(0)RR} U_1). \quad (49)$$

Очевидно, что условие на спектр должно быть записано как

$$\gamma_0(\omega) = 0. \quad (50)$$

Кроме того, для исследования спектра нам пригодятся $G_{\delta_1\delta_1}^{RR} = \gamma_1/\gamma_0$ и $G_{\delta_1\delta_2}^{RR} = \gamma_2/\gamma_0$. Эти выражения для функций Грина получены по правилу Крамера. Здесь γ_1 и γ_2 представляют собой детерминанты матриц, полученных из матрицы системы заменой первого и второго столбцов соответственно на столбец, состоящий из функций

$$G_{\delta\delta''}^{(0)RR} + U_0 G_{\delta 0}^{(0)RL} G_{0\delta''}^{LR}. \quad (51)$$

Переписывая все используемые выражения через $\Gamma(\omega)$, получим

$$\gamma_0 = -\frac{1}{108}\lambda\theta^2, \quad \gamma_1 = \frac{1}{108t}\theta\mathcal{D}, \quad \gamma_2 = -\frac{1}{108t}\theta\mathcal{B}, \quad (52)$$

$$\lambda = -3 - \frac{U_1\omega}{t^2}(1 - \omega^2\Gamma(\omega)), \quad (53)$$

$$\theta = 6 + \frac{U_1\omega}{t^2}(-1 + \Gamma(\omega)(\omega^2 - 9t^2)), \quad (54)$$

$$\mathcal{D} = \tilde{\mathcal{D}} - \frac{\Delta_2}{\Delta}U_0(-1 + \omega^2\Gamma(\omega))\theta, \quad (55)$$

$$\tilde{\mathcal{D}} = \frac{U_1\omega^2}{t^3} + \frac{\omega^4 U_1(\omega^2 - 9t^2)}{t^3}\Gamma^2(\omega) + \Gamma(\omega)\left(18t^2 + 9U_1\omega - 2\frac{U_1\omega^3}{t^2}\right)\frac{\omega}{t} \quad (56)$$

$$\mathcal{B} = \tilde{\mathcal{B}} + \frac{\Delta_2}{\Delta}U_0(-1 + \omega^2\Gamma(\omega))\theta, \quad (57)$$

$$\tilde{\mathcal{B}} = \frac{3\omega}{t}(1 - \Gamma(\omega)(\omega^2 - 3t^2)). \quad (58)$$

Поскольку γ_0 разбивается на два множителя, то мы имеем два различных условия на спектр:

$$\lambda(\omega) = 0, \quad \theta(\omega) = 0.$$

Выразим их через $\Gamma(\omega)$. В первом случае получим

$$\Gamma(\omega) = \Gamma_2(\omega), \quad (59)$$

а во втором –

$$\Gamma(\omega) = \Gamma_3(\omega), \quad (60)$$

где

$$\Gamma_2(\omega) \doteq \frac{1}{\omega^2} + \frac{3t^2}{U_1\omega^3} = \frac{\omega + \frac{3t^2}{U_1}}{\omega^3}, \quad (61)$$

$$\Gamma_3(\omega) \doteq \frac{1 - \frac{6t^2}{U_1\omega}}{\omega^2 - 9t^2}. \quad (62)$$

Видим, что мы получили условия, похожие по виду на (46). Их решениями мы займемся позднее.

3.1.5 Аналитические свойства функции $\Gamma(\omega)$

Как уже было указано выше, функция

$$\Gamma(\omega) = V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})},$$

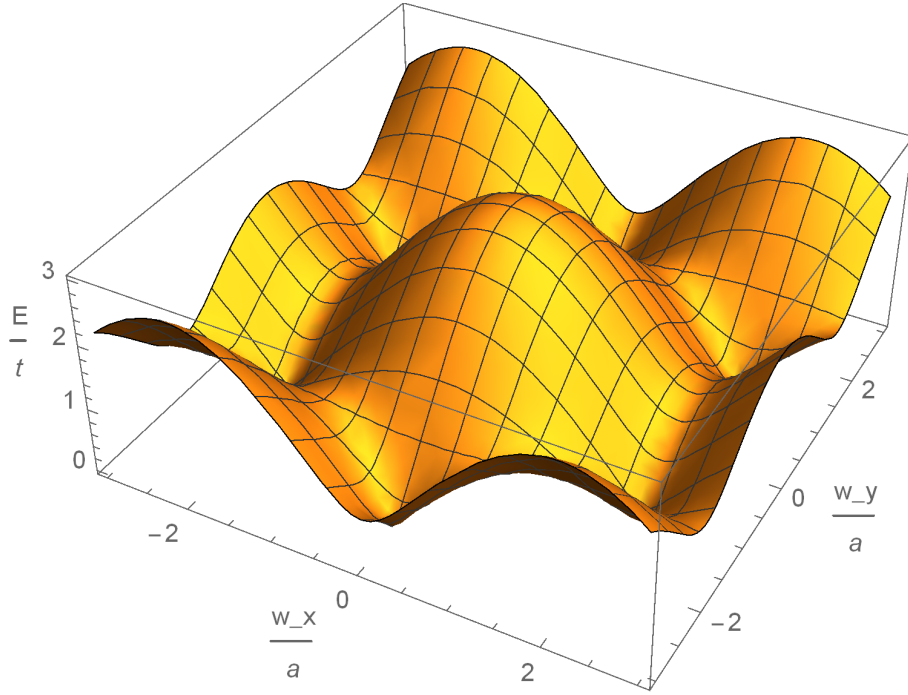


Рис. 2: Беспримесный спектр электронов в графене

где

$$\varepsilon(\mathbf{w}) = t \sqrt{4 \cos^2 \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a w_y \right) + 4 \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2} a w_y \right) \cos \left(\frac{3}{2} a w_x \right) + 1}.$$

На рисунке 2 показано, как $\varepsilon(\mathbf{w})$ ведет себя в пределах зоны Бриллюэна. Можно убедиться, что она принимает максимальное значение, равное $3t$ в центре зоны. Легко проверить, что в окрестности этой точки спектр запишется в виде

$$\varepsilon \approx 3t - \frac{3}{2} t a^2 w^2. \quad (63)$$

Также на краю зоны имеются две неэквивалентные точки Дирака, в которых энергия зануляется. Спектр для их окрестностей приводится, например, в [5] и является линейным:

$$\varepsilon(\mathbf{k} + s\mathbf{w}_D) = \frac{3}{2} t a k, \quad \mathbf{w}_D = \left(0; \frac{4\sqrt{3}\pi}{9a} \right)^T. \quad (64)$$

Исследуем, как $\Gamma(\omega)$ ведет себя в различных точках. Так при $|\omega| > 3t$

$$\begin{aligned}\Gamma(\omega) &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} = \frac{V}{\omega^2} \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{1 - \frac{\varepsilon^2(\mathbf{w})}{\omega^2}} = \\ &= V \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{\omega^{2(k+1)}} \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} (R_{L,\mathbf{w}} R_{R,\mathbf{w}})^k. \quad (65)\end{aligned}$$

Подобные интегралы нам еще встретятся, так что поговорим о них подробнее. Пусть $\Pi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{\alpha,\beta}(k)$ – это количество способов, которыми можно перейти из атома $\mathbf{r}_{\mathbf{n}}^{\alpha}$ в атом $\mathbf{r}_{\mathbf{m}}^{\beta}$, сделав ровно k перескоков между ближайшими соседями. Из определения $R_{\alpha,\mathbf{w}}$ (8) видим, что

$$\Pi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{\alpha,\alpha}(2k) = V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} (R_{L,\mathbf{w}} R_{R,\mathbf{w}})^k e^{i\mathbf{w}(\mathbf{r}_{\mathbf{m}} - \mathbf{r}_{\mathbf{n}})}; \quad (66)$$

$$\Pi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{\alpha,\alpha}(2k+1) = 0; \quad (67)$$

$$\Pi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{\bar{\alpha},\alpha}(2k) = 0; \quad (68)$$

$$\Pi_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^{\bar{\alpha},\alpha}(2k+1) = V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} (R_{\bar{\alpha},\mathbf{w}})^{k+1} (R_{R,\mathbf{w}})^k e^{i\mathbf{w}(\mathbf{r}_{\mathbf{m}}^{\alpha} - \mathbf{r}_{\mathbf{n}}^{\bar{\alpha}})}. \quad (69)$$

Отсюда получаем разложение для $\Gamma(\omega)$ на бесконечности в виде

$$\Gamma(\omega) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^{2k} \Pi_{\mathbf{0},\mathbf{0}}^{L,L}(2k)}{\omega^{2(k+1)}} = \frac{1}{\omega^2} + \frac{3t^3}{\omega^4} + \frac{15t^4}{\omega^6} + \dots \quad (70)$$

В области спектра $\omega \in (-3t; 3t)$ у $\Gamma(\omega)$ имеется мнимая часть. В самом деле:

$$\begin{aligned}\Gamma(\omega) &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\omega} \left(\frac{1}{\omega - \varepsilon(\mathbf{w})} + \frac{1}{\omega + \varepsilon(\mathbf{w})} \right) = \\ &= \frac{1}{2\omega} \int_{-3t}^{3t} d\varepsilon \frac{\nu(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon + i0} = \frac{1}{2\omega} \left(v.p. \int_{-3t}^{3t} d\varepsilon \frac{\nu(\varepsilon)}{\omega - \varepsilon} - i\pi\nu(\omega) \right). \quad (71)\end{aligned}$$

Точная формула для плотности состояний $\nu(\varepsilon)$ приводится, например, в [6]. Нам же не столько важно точное выражение для нее, сколько ее асимптотики в особых точках:

$$\nu(\omega \approx \pm 3t) = \frac{\sqrt{3}}{2\pi t}, \quad (72)$$

$$\nu(\omega \approx 0) = \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2} |\omega|, \quad (73)$$

$$\nu(\omega \approx \pm t) = -\frac{1}{2\pi^2 t} \log \left| \frac{\omega}{t} \mp 1 \right| \quad (74)$$

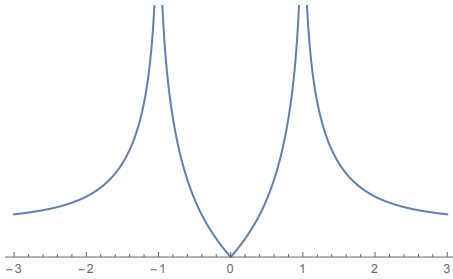
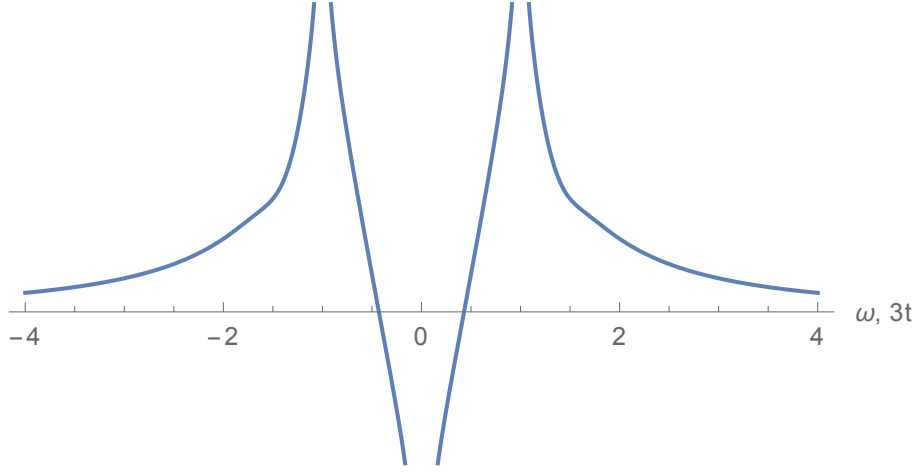


Рис. 3: Плотность состояний в решетке графена

Рис. 4: Функция $\Gamma(\omega)$

Действительная часть $\Gamma(\omega)$ расходится логарифмически в точках $\pm 3t$ и 0.

В самом деле, при $\omega \approx 3t$

$$\begin{aligned} \Gamma(-3t - \delta\omega) &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{(-3t - \delta\omega)^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} \approx \\ &\approx \frac{-V}{12\pi t} \int_0^{w_+} \frac{wdw}{-\delta\omega - \frac{3}{4}t^2w^2a^2} = \frac{V}{18\pi a^2t^2} \log \frac{\delta\omega + \frac{3}{4}w_+^2a^2t}{\delta\omega} \approx \\ &\approx -\frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2} \log \frac{\delta\omega}{t}. \end{aligned} \quad (75)$$

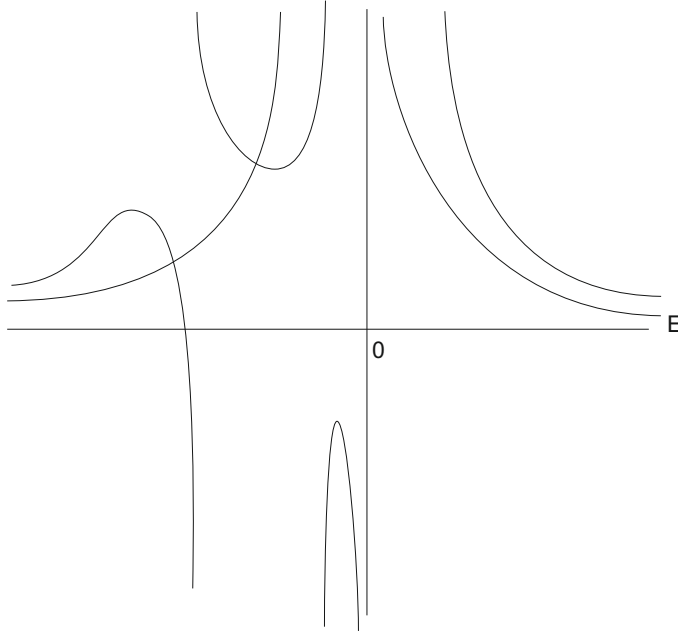
Для $\omega \approx 0$:

$$\Re\Gamma(\omega) = \int_0^{3t} d\varepsilon \frac{\nu(\varepsilon)}{\omega^2 - \varepsilon^2} \approx \int_0^\alpha d\varepsilon \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2} \frac{\varepsilon}{\omega^2 - \varepsilon^2} \approx \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2} \log \frac{|\omega|}{t}. \quad (76)$$

Поведение вещественной части функции $\Gamma(\omega)$ показано на графике 4.

3.2 Получение решений вне непрерывного спектра

Как было получено выше, все условия на точки спектра сводятся к виду $\Gamma(\omega) = \Gamma_i(\omega)$, где $\Gamma_i(\omega)$ – некая рациональная функция своего аргумента. Поскольку мы знаем, как функция $\Gamma(\omega)$ ведет себя в различных точках,

Рис. 5: Функции $\Gamma_1(\omega)$ и $\Gamma(\omega)$

то с помощью графического исследования задачи мы можем получить выражения для решений.

Мы исследуем все уравнения по порядку. При рассмотрении будем считать, что $-U_0, -U_1 \gg t$.

3.2.1 Уравнение (46)

Рассмотрим функцию

$$\Gamma_1(\omega) = \frac{\frac{U_1}{3t^2}(\omega - U_0) + 1}{\frac{U_1}{3t^2}\omega^3 + U_0\omega - \frac{U_0U_1}{3t^2}\omega^2}.$$

Можно доказать, что при $\omega > 0$ выполняется $\Gamma(\omega) > 1/\omega^2 > \Gamma_1(\omega)$, что доказывает, что при $\omega > 0$ уравнение не имеет решений.

Пусть $\omega \rightarrow -\infty$. Тогда

$$\Gamma_1(\omega) = \frac{1}{\omega^2} \frac{1 + \frac{1}{\omega} \left(-U_0 + \frac{3t^2}{U_1} \right)}{1 - \frac{U_0}{\omega} + \frac{3t^2U_0}{U_1\omega^2}} \approx \frac{1}{\omega^2} \left(1 + \frac{1}{\omega} \frac{3t^2}{U_1} + \frac{0}{\omega^2} + \dots \right), \quad (77)$$

$$\Gamma_1(\omega) - \Gamma(\omega) \approx \frac{3t^2}{\omega^3 U_1} > 0. \quad (78)$$

Отсюда следует, что при $\omega < -3t$ и $-U_0, -U_1 \gg 3t$ уравнение имеет хотя бы два решения (см. рис. 5).

Функция $\Gamma_1(\omega)$ имеет нуль в точке $\omega_0 = -\frac{3t^2}{U_1} + U_0$ и полюса в точках $0, \omega_1 = \frac{U_0}{2} + \frac{U_0}{2} \sqrt{1 - \frac{12t^2}{U_0 U_1}}, \omega_2 = \frac{U_0}{2} - \frac{U_0}{2} \sqrt{1 - \frac{12t^2}{U_0 U_1}}$. Найдем первый корень E_1 уравнения (46). Заметим, что $\omega_0 \approx \omega_1$, отсюда можем заключить, что функция убывает в окрестности ω_0 очень быстро, и в первом приближении $E_1 \approx \omega_1 \approx U_0$. Пусть $E_1 = U_0 + \delta\omega$. Тогда

$$\begin{aligned} \frac{E_1 - \omega_0}{E_1 - \omega_1} &= E_1 \left(E_1 - \frac{3t^2}{U_1} \right) \Gamma(E_1) \approx E_1 \left(E_1 - \frac{3t^2}{U_1} \right) \left(\frac{1}{E_1^2} + \frac{3t^2}{E_1^4} + \dots \right) = \\ &= \left(1 - \frac{3t^2}{U_1 E_1} \right) \left(1 + \frac{3t^2}{E_1^2} + \dots \right), \\ \frac{\delta\omega + U_0 - \omega_0}{\delta\omega + U_0 - \omega_1} &\approx \frac{\delta\omega + \frac{3t^2}{U_1}}{\delta\omega + \frac{3t^2}{U_1} + \frac{18t^4}{U_0 U_1^2} + \dots} = \frac{1}{1 + \left(\frac{18t^4}{U_0 U_1^2} + \dots \right) \frac{1}{\delta\omega + \frac{3t^2}{U_1}}} \approx \\ &\approx 1 - \left(\frac{18t^4}{U_0 U_1^2} + \dots \right) \frac{1}{\delta\omega + \frac{3t^2}{U_1}}. \end{aligned}$$

Пусть $\delta\omega = \frac{3t^2}{U_1} C$. Тогда в первом приближении

$$\begin{aligned} -\frac{1}{C+1} \frac{6t^2}{U_0 U_1} &\approx -\frac{3t^2}{E_1^2} \left(\frac{E_1}{U_1} - 1 \right), \\ C &\approx \frac{2U_0}{U_0 - U_1} - 1 = \frac{U_0 + U_1}{U_0 - U_1}. \end{aligned}$$

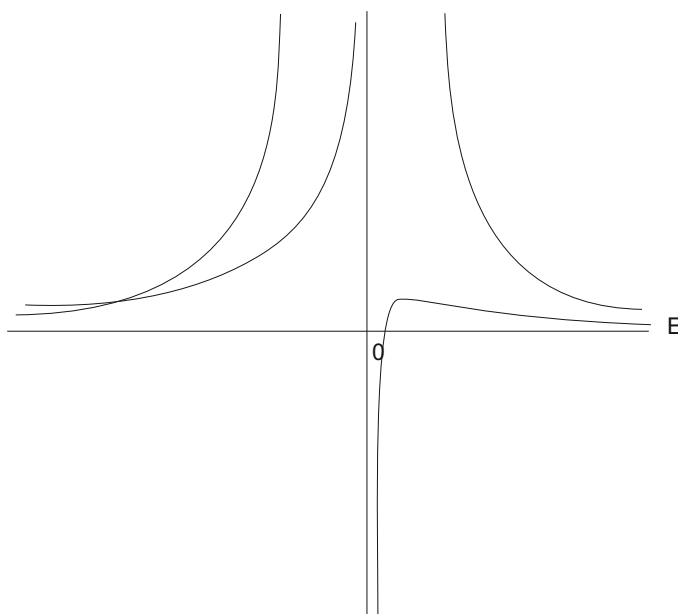
Отсюда получаем, что

$$E_1 \approx U_0 + \frac{3t^2}{U_1} \frac{U_0 + U_1}{U_0 - U_1} + \dots \quad (79)$$

Заметим, что мы при выводе полагали, что U_0 и U_1 находятся не слишком близко друг к другу. В случае $|U_0 - U_1| \ll |U_0|$ формула (79) недействительна.

Рассмотрим теперь второе значение энергии E_2 . Будем считать, что $-3t - E_2 \ll t$. Пусть теперь $\delta\omega = -3t - E_2$. Тогда из формулы (75)

$$\begin{aligned} -\frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2} \log \frac{\delta\omega}{t} &\approx \Gamma_1(-3t) = \frac{\frac{U_1}{t} + \frac{U_1 U_0}{3t^2} - 1}{9U_1 t + 3U_0 t + 3U_0 U_1} \approx \frac{1}{9t^2}, \\ \log \frac{\delta\omega}{t} &\approx -\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}, \\ \delta\omega &\approx t e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} \approx 0.1t. \end{aligned}$$

Рис. 6: Функции $\Gamma_2(\omega)$ и $\Gamma(\omega)$

Мы видим, что условие $\delta\omega \ll t$ выполнено.

Отсюда

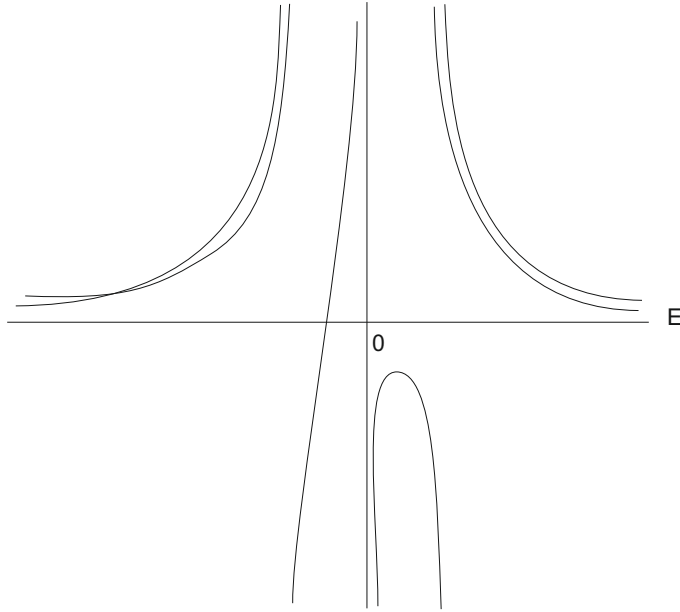
$$E_2 \approx -3t - te^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}. \quad (80)$$

3.2.2 Уравнение (59)

Теперь нам нужно рассмотреть функцию

$$\Gamma_2(\omega) = \frac{1}{\omega^2} + \frac{3t^2}{U_1\omega^3}.$$

Так же как и в предыдущем случае, мы можем доказать, что все корни уравнения отрицательны. Кроме того, из графика видим, что корень один.

Рис. 7: Функции $\Gamma_3(\omega)$ и $\Gamma(\omega)$

Преобразуем данное уравнение:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\omega^2} + \frac{3t^2}{U_1\omega^3} &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}, \\ \frac{3t^2}{U_1\omega^3} &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \left(\frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} - \frac{1}{\omega^2} \right) = \frac{1}{\omega^2} V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{\varepsilon^2(\mathbf{w})}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}, \\ \frac{3t^2}{U_1} &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{\omega\varepsilon^2(\mathbf{w})}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} \approx \frac{3t^2}{\omega} + \frac{15t^4}{\omega^3} + \frac{78t^6}{\omega^5} + \dots, \\ \omega &\approx U_1 \left(1 + \frac{5t^2}{\omega^2} + \frac{26t^4}{\omega^4} \right). \end{aligned}$$

Отсюда мы получаем

$$E_3 = U_1 + \frac{5t^2}{U_1} - \frac{24t^4}{U_1^3} + \dots \quad (81)$$

3.2.3 Уравнение (60)

Теперь рассмотрим, наконец, функцию

$$\Gamma_3(\omega) = \frac{1 - \frac{6t^2}{U_1\omega}}{\omega^2 - 9t^2}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{1}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} &= \frac{1 - \frac{6t^2}{U_1 \omega}}{\omega^2 - 9t^2}, \\ \frac{6t^2}{U_1 \omega} &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}}{(2\pi)^2} \left(1 - \frac{\omega^2 - 9t^2}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} \right) = V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}}{(2\pi)^2} \frac{9t^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}{\omega^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})}, \\ \frac{6t^2}{U_1 \omega} &\approx \frac{1}{\omega^2} (9t^2 - 3t^2) + \frac{1}{\omega^4} V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}}{(2\pi)^2} \varepsilon^2(\mathbf{w}) (9t^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})) = \\ &= \frac{6t^2}{\omega^2} + \frac{12t^4}{\omega^4}. \end{aligned}$$

Отсюда

$$E_4 \approx U_1 + \frac{2t^2}{U_1} + \dots \quad (82)$$

3.2.4 Применимость полученных решений

Рассмотрим вопрос о том, насколько сильно полученные решения локализованы вокруг примеси. Для этого изучим частный случай уравнения (17):

$$G_{\mathbf{nn}}^{\alpha\alpha}(\omega) = G_{\mathbf{nn}}^{(0)\alpha\alpha}(\omega) + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega) G_{\mathbf{0n}}^{L\alpha}(\omega) U_0 + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)\alpha R}(\omega) G_{\delta\mathbf{n}}^{R\alpha}(\omega) U_1. \quad (83)$$

Известно, что в окрестности точки спектра функция Грина ведет себя так, что

$$G_{\mathbf{nn}}^{\alpha\alpha}(\omega) \approx \frac{|\Psi_{\mathbf{n}}|^2}{\omega - E}, \quad (84)$$

где $q_{\mathbf{n}} = |\Psi_{\mathbf{n}}|^2$ – вероятность найти электрон в этой точке. Тогда из уравнения (83) видим, что

$$|\Psi_{\mathbf{n}}|^2 = U_0 G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L}(\omega) \Psi_{\mathbf{0}}^* \Psi_{\mathbf{n}} + U_1 \sum_{\delta} G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)\alpha R}(\omega) \Psi_{\delta}^* \Psi_{\mathbf{n}}, \quad (85)$$

или

$$\Psi_{\mathbf{n}} = U_0 G_{\mathbf{0n}}^{(0)L\alpha}(\omega) \Psi_{\mathbf{0}} + U_1 \sum_{\delta} G_{\delta\mathbf{n}}^{(0)R\alpha}(\omega) \Psi_{\delta}. \quad (86)$$

Рассмотрим функции $G_{\mathbf{0n}}^{(0)L\alpha}(\omega)$, $G_{\delta\mathbf{n}}^{(0)R\alpha}(\omega)$. На странице 13 были доказаны формулы для интегральных выражений, содержащих энергию квазичастиц. Используя выражения (13, 14) для беспримесных функций Грина, можем получить, что при $|\omega| > 3t$

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta}(\omega) = (-1)^{\delta_{\alpha\beta}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{\omega^{k+1}} \Pi_{\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\alpha\beta}(k). \quad (87)$$

Исследуем вопрос сходимости этого ряда. Количество путей длины k , соединяющих две точки, не может быть больше, чем общее число путей, выходящих из определенной точки и имеющих эту длину. По-другому,

$$\Pi_{\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\alpha\beta}(k) \leq 3^k. \quad (88)$$

Тогда становится очевидно, что достаточное условие сходимости ряда записывается как $|\omega| > 3t$. Легко понять, что оно же является и необходимым. Отсюда по формуле Коши-Адамара получим

$$\Pi_{\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\alpha\beta}(k) = \phi_{\mathbf{m},\mathbf{n}}^{\alpha\beta}(k) 3^k, \quad \sqrt[k]{\phi(k)} \rightarrow 1. \quad (89)$$

Заметим, что чем дальше точки находятся друг от друга, тем больше порядок члена, с которого начинается ряд. Тогда, если $|\omega| \gg 3t$, то

$$\Psi_{\mathbf{n}} \approx U_0 \Psi_{\mathbf{0}} \frac{t^l}{\omega^{l+1}} \Pi_{\mathbf{0},\mathbf{n}}^{L,\alpha}(l) + U_1 \Psi_{\delta} \frac{t^{l_1}}{\omega^{l_1+1}} \Pi_{\delta,\mathbf{n}}^{R,\alpha}(l_1). \quad (90)$$

Здесь l, l_1 – минимальные расстояния от данного атома до примеси и любого ее ближайшего соседа соответственно.

Сначала рассмотрим р-состояния. Для них $\Psi_{\mathbf{0}} = 0$, и тогда

$$|\Psi_{\mathbf{n}}| \approx \left| U_1 \Psi_{\delta} \frac{t^{l_1}}{\omega^{l_1+1}} \right| \Pi_{\delta,\mathbf{n}}^{R,\alpha}(l_1) = |\Psi_{\delta}| \left(\frac{3t \sqrt[l_1]{\phi(l_1)}}{|U_1|} \right)^{l_1} \leq |\Psi_{\delta}| \left(\frac{3t}{|U_1|} \right)^{l_1}, \quad (91)$$

так как $E_3 \approx E_4 \approx U_1$, то есть вероятность спадает с расстоянием экспоненциально.

Теперь рассмотрим s-состояния. Понятно, что для E_1 применимы те же рассуждения, что и для р-состояний. Проблема возникает со слабо отщепленным состоянием E_2 . Посмотрим, как ведут себя функции $G_{0,0}^{L,L}, G_{\delta,\delta}^{R,R}$ при $\omega \approx E_2$:

$$\begin{aligned}
\frac{\Delta(\omega)}{\omega - E_2} &\approx \frac{U_1}{3t^2}(E_2 - U_0)(-2E_2\Gamma(E_2) - E_2^2\Gamma'(E_2)) + \frac{U_1}{3t^2}(1 - E_2^2\Gamma(E_2)) - \\
&- U_0E_2\Gamma'(E_2) - U_0\Gamma(E_2) \approx -\frac{U_1U_0}{3t^2} \left(-6t \frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2} \log \frac{\delta\omega}{t} - 9t^2 \frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2 \delta\omega} \right) + \\
&+ \frac{U_1}{3t^2} \left(1 + 9t^2 \frac{\sqrt{3}}{13\pi t^2} \log \frac{\delta\omega}{t} \right) + 3tU_0 \frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2 \delta\omega} + U_0 \frac{\sqrt{3}}{12\pi t^2} \log \frac{\delta\omega}{t} \approx \\
&\approx \frac{U_1U_0}{3t^3} \left(\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} - \frac{2}{3} \right); \\
\Delta_1(E_2) &= \frac{U_1}{3t^2} + E_2\Gamma(E_2) \left(1 - \frac{U_1E_2}{3t^2} \right) \approx -\frac{U_1}{9t^2} e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}, \\
G_{00}^{LL}(\omega) &\approx -\frac{t}{3U_0} \frac{e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}}{\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} - \frac{2}{3}} \frac{1}{\omega - E_2}; \\
\Delta_2 &= \frac{1}{3t} (1 - (3t + te^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}})^2 \Gamma(E_2)) \approx -\frac{1}{3t} 6t^2 e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} \frac{1}{9t^2} = -\frac{2}{9t} e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}, \\
G_{0\delta}^{LR}(\omega) &\approx -\frac{2t^2}{3U_0U_1} \frac{e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}}{\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} - \frac{2}{3}} \frac{1}{\omega - E_2}; \\
\mathcal{D} &\approx 3tU_0\Delta_2\theta G_{0\delta}^{LR}(\omega), \\
G_{\delta\delta}^{RR}(\omega) &= -\frac{\theta\mathcal{D}}{t\lambda\theta^2} \approx -\frac{3U_0\Delta_2 G_{0\delta}^{LR}(\omega)}{\lambda}, \\
\lambda &\approx -3 - 3\frac{U_1\omega}{t} \Delta_2 \approx -2\frac{U_1}{t} e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}, \\
G_{\delta\delta}^{RRR}(\omega) &\approx \frac{3U_0t}{2U_1} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} \frac{2}{9t} e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} \frac{2t^2}{3U_0U_1} \frac{e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}}{\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} - \frac{2}{3}} \frac{1}{\omega - E_2} \approx \\
&\approx \frac{2t^2}{9U_1^2} \frac{e^{-\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}}}{\frac{3\sqrt{3}}{4\pi} e^{\frac{4\sqrt{3}\pi}{9}} - \frac{2}{3}} \frac{1}{\omega - E_2}.
\end{aligned}$$

Отсюда видим, что $q_0, q_1 \ll 1$. Это значит, что электрон почти никогда не находится на центральных атомах, и приближение для этого случая неприменимо.

3.2.5 Влияние соотношения между энергиями на решения

Исследуем, как будут меняться энергии р-состояний при приближении U_1 к $-3t$. Как можно убедиться по виду функций $\Gamma_2(\omega), \Gamma_3(\omega)$, решения

E_3, E_4 при этом будут передвигаться ближе к $-3t$. С другой стороны, условие (91) становится при этом неприменимым, то есть можно ожидать, что состояние перестанет быть локализованным на небольшом количестве атомов. Это соответствует тому, что мы ожидаем по физике задачи.

Рассмотрим теперь s -состояния. Вывод для энергии E_1 слабо меняется, если U_1 приближается к $-3t$, а $-U_0$ остается большим. На локализацию состояния это тоже не влияет. Изменение U_0 , с другой стороны, сильно меняет решения. E_1 передвигается ближе к краю зоны, а E_2 в некоторый момент исчезает вообще.

Таким образом, достаточные условия существования и локализации состояния с энергией E_1 состоит в том, что

$$-U_0 \gg 3t, \quad |U_0 - U_1| \sim |U_0|, \quad (92)$$

а для состояний E_3, E_4 :

$$-U_1 \gg 3t. \quad (93)$$

3.3 Резонансные состояния

Ранее мы рассмотрели состояния, которые могут возникнуть в задаче вне непрерывного спектра. Теперь мы рассмотрим почти связанные состояния, или резонансы, которые могут находиться внутри зоны (подробнее о резонансах: [7]). Нам нужно исследовать задачу на их наличие.

3.3.1 Условия на существование и локализацию резонансов в пространстве

Прежде чем искать резонансные состояния, изучим вопрос о том, каким условиям должен удовлетворять резонанс, чтобы приближение, в котором мы работаем, было применимым для него. При наличии резонанса в точке ω_0 имеет смысл записать частотные функции Грина в форме

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{Z_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega)}{\omega - \omega_0 + i\gamma(\omega)}, \quad (94)$$

где на действительной оси

$$\Im\gamma(\omega) = 0. \quad (95)$$

Считается, что в окрестности резонанса

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) \approx \frac{Z_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega_0)}{\omega - \omega_0 + i\gamma(\omega_0)}. \quad (96)$$

Для того чтобы это выполнялось, нужно, чтобы $\gamma(\omega)$ и $Z(\omega)$ менялись не очень сильно в окрестности ω_0 .

Допустим, что резонансное состояние появляется как решение точного уравнения Дайсона (16):

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = G^{(0)\alpha\beta}_{\mathbf{nm}}(\omega) + \sum_{\gamma, \mathbf{p}} G^{(0)\alpha\gamma}_{\mathbf{np}}(\omega) U_{\mathbf{p}}^{\gamma} G_{\mathbf{pm}}^{\gamma\beta}(\omega).$$

Так же как и в случаях отщепленных состояний, мы можем заменить это уравнение приближенным

$$G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega) = G^{(0)\alpha\beta}_{\mathbf{nm}}(\omega) + G^{(0)\alpha L}_{\mathbf{n0}}(\omega) U_0 G_{\mathbf{0m}}^{L\beta}(\omega) + \sum_{\delta} G^{(0)\alpha R}_{\mathbf{n\delta}}(\omega) U_1 G_{\delta\mathbf{m}}^{R\beta}(\omega),$$

если функции $G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega)$ быстро спадают при удалении узла \mathbf{n} от центра. Это должно происходить в той области, где расположен резонанс.

Можно заметить, что уравнение (94) не до конца фиксирует выбор функций γ и Z . Чтобы сделать это, рассмотрим функцию $G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)$ (или $G_{\delta_1\delta_1}^{RR}(\omega)$ для \mathbf{p} -состояний). Поскольку нам интересно поведение функций в окрестности ω_0 , можно положить $\Im(Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)/Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega_0)) = 0$. Теперь все функции $Z_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}(\omega)$, а также функция $\gamma(\omega)$, будут фиксированы окончательно.

Явный вид функции γ определяется равенством аргументов левой и правой части уравнения (94). Функции же $Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)$ фиксируется равенством модулей. Можно выписать явный вид для них:

$$Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega) = iG_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega_0) \left| \frac{G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)}{G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega_0)} \right| \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2(\omega)}. \quad (97)$$

Теперь мы готовы получить условие на существование резонанса в точке ω_0 . Для этого рассмотрим мнимую часть от уравнения (94) в нулевом узле. Получаем

$$\Im G_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega) = \frac{\Im Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)(\omega - \omega_0) - \Re Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega)\gamma(\omega)}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2(\omega)}. \quad (98)$$

Полученная мнимая часть пропорциональна плотности состояний для системы, умноженной на вероятность найти электрон на этом узле (обозначим это произведение как $\nu_0(\omega)$). В окрестности резонанса она должна иметь вид лоренцианы. Отсюда видим, что условие на наличие резонанса в точке должно выписываться в виде

$$\Im Z_{\mathbf{00}}^{LL}(\omega_0) = 0, \quad (99)$$

или

$$\Re G_{00}^{LL}(\omega_0) = 0, \quad (100)$$

что аналогично.

Для функций Грина нулевого узла мы получили выражение

$$G_{00}^{LL}(\omega) = \frac{\Delta_1(\omega)}{\Delta(\omega)} = \frac{|\Delta_1(\omega)|^2}{\Delta(\omega)\Delta_1^*(\omega)}. \quad (101)$$

Таким образом, необходимое условие наличия резонанса в точке имеет вид

$$\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0)) = 0. \quad (102)$$

Для r -состояний условие аналогично и выписывается в виде

$$\Re(\gamma_0(\omega_0)\gamma_1^*(\omega_0)) = 0. \quad (103)$$

С другой стороны, даже если это условие выполняется, прежде чем мы сможем считать, что в точке ω_0 действительно существует резонанс, мы должны проверить, является ли он локализованным на масштабах зоны, не меняется ли функция $\gamma(\omega)$ слишком быстро в его окрестности, и, кроме того, соответствует ли он приближению сильной локализации, в котором мы рассматриваем нашу задачу.

3.3.2 Ширина резонанса

В окрестности резонанса верно равенство

$$G_{00}^{LL}(\omega) = \frac{|\Delta_1(\omega)|^2}{C(\omega)(\omega - \omega_0) + i\Im(\Delta(\omega)\Delta_1^*(\omega))}. \quad (104)$$

Здесь $C(\omega)$ – некоторая несингулярная в ω_0 функция. Кроме того,

$$G_{00}^{LL}(\omega) \approx \frac{|\Delta_1(\omega_0)|^2}{\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'(\omega - \omega_0) + i\Im(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))}. \quad (105)$$

Отсюда видим, что

$$Z_{00}^{LL}(\omega_0) \approx \frac{|\Delta_1(\omega_0)|^2}{\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'}, \quad \gamma(\omega_0) \approx \frac{\Im(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))}{\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'}. \quad (106)$$

От того, какой величины будет $\gamma(\omega_0)$, зависит, насколько широк резонанс. В самом деле, мнимая часть функции $G_{00}^{LL}(\omega)$ спадает наполовину

при $\delta\omega \sim |\gamma(\omega_0)|$. Это значит, что условие на то, чтобы резонансы были узкими, записывается в виде

$$\left| \frac{\Im(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))}{\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'} \right| \ll t. \quad (107)$$

Для р-состояний имеем аналогичное условие

$$\left| \frac{\Im(\mathcal{D}^*(\omega_0)\theta(\omega_0)\lambda(\omega_0))}{\Re(\mathcal{D}^*(\omega_0)\theta(\omega_0)\lambda(\omega_0))'} \right| \ll t. \quad (108)$$

Формально говоря, функция (105) должна содержать в знаменателе еще одно слагаемое вида $\Im(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'(\omega - \omega_0)$ – линейную поправку от мнимой части. Если она окажется большой, то это будет означать, что $\gamma(\omega)$ быстро меняется в окрестности точки ω_0 . Будем считать, что это значит, что в точке нет резонанса. Тогда получаем еще одно условие:

$$\left| \frac{\Im(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'}{\Re(\Delta(\omega_0)\Delta_1^*(\omega_0))'} \right| \ll 1. \quad (109)$$

Исследуем, в каких энергиях должен лежать резонанс, чтобы он был локализованным по энергиям. Сначала рассмотрим s-состояния. Для них

$$\gamma = \frac{\Re\Delta_1\Im\Delta - \Im\Delta_1\Re\Delta}{(\Re\Delta\Re\Delta_1 + \Im\Delta\Im\Delta_1)'}. \quad (110)$$

Подставляя выражения для Δ, Δ_1 , получаем

$$\begin{aligned} \gamma = & -\frac{\pi\nu(\omega)}{2} \left[\left(\frac{U_1}{3t^2}(1 - \omega^2\tilde{\Gamma}(\omega)) + \omega\tilde{\Gamma}(\omega) \right) \left(-U_0 - \omega\frac{U_1}{3t^2}(\omega - U_0) \right) - \right. \\ & \left. - \left(\frac{U_1}{3t^2}(1 - \omega^2\tilde{\Gamma}(\omega))(\omega - U_0) - U_0\omega\tilde{\Gamma}(\omega) + 1 \right) \left(1 - \omega\frac{U_1}{3t^2} \right) \right] / \\ & / \left[\left(\frac{U_1}{3t^2}(1 - \omega^2\tilde{\Gamma}(\omega))(\omega - U_0) - U_0\omega\tilde{\Gamma}(\omega) + 1 \right) \times \right. \\ & \quad \times \left(\frac{U_1}{3t^2}(1 - \omega^2\tilde{\Gamma}(\omega)) + \omega\tilde{\Gamma}(\omega) \right) + \\ & \quad \left. + \left(\frac{\pi\nu(\omega)}{2} \right)^2 \left(1 - \frac{U_1}{3t^2}\omega \right) \left(-U_0 - \omega\frac{U_1}{3t^2}(\omega - U_0) \right) \right]'. \quad (111) \end{aligned}$$

Переписывая это иначе, получаем

$$\begin{aligned} \gamma = & -\frac{\pi\nu(\omega)}{2} \left[-1 + \Gamma(\omega)\omega^2 \frac{U_0 U_1}{3t^2} \left(1 - \omega \frac{U_1}{3t^2} \right) \right] / \\ & / \left[\left(\frac{U_1}{3t^2} (1 - \omega^2 \tilde{\Gamma}(\omega)) (\omega - U_0) - U_0 \omega \tilde{\Gamma}(\omega) + 1 \right) \times \right. \\ & \quad \times \left(\frac{U_1}{3t^2} (1 - \omega^2 \tilde{\Gamma}(\omega)) + \omega \tilde{\Gamma}(\omega) \right) + \\ & \quad \left. + \left(\frac{\pi\nu(\omega)}{2} \right)^2 \left(1 - \frac{U_1}{3t^2} \omega \right) \left(-U_0 - \omega \frac{U_1}{3t^2} (\omega - U_0) \right) \right]'. \quad (112) \end{aligned}$$

Здесь под $\tilde{\Gamma}(\omega)$ подразумевается действительная часть $\Gamma(\omega)$.

Исследуем, при каких ω $|\gamma(\omega)|$ будет мало. Сначала рассмотрим значения энергии, близкие к центру зоны. При $|\omega| \ll t$

$$\begin{aligned} \gamma & \approx \frac{\sqrt{3}}{3t^2} |\omega| \frac{1}{\left(\left(-\frac{U_1 U_0}{3t^2} + \omega \frac{U_1}{3t^2} - U_0 \omega \Gamma(\omega) + 1 \right) \left(\frac{U_1}{3t^2} + \omega \Gamma(\omega) \right) \right)'} \approx \\ & \approx \frac{\sqrt{3}}{3t^2} |\omega| \frac{1}{\left(\frac{U_1}{3t^2} - U_0 \Gamma(\omega) \right) \frac{U_1}{3t^2} + \left(1 - \frac{U_0 U_1}{3t^2} \right) \Gamma(\omega) - 2 \frac{U_0 U_1}{3t^2} \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2}} \approx \\ & \approx \frac{\sqrt{3}}{3t^2} |\omega| \frac{1}{\frac{U_1}{9t^4} \left(U_1 - \frac{4\sqrt{3}}{\pi} U_0 \right) + \left(1 - \frac{2U_0 U_1}{3t^2} \right) \left[\frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2} \log \frac{|\omega|}{t} + \frac{c}{t^2} \right]}. \quad (113) \end{aligned}$$

Видим, что, в принципе, при этих энергиях существование резонанса возможно.

Далее, резонанс возможен в областях, близких к сингулярностям знаменателя. Они присутствуют в точках $\pm t$ и $\pm 3t$. Также нужно проверить, при каких значениях ω обнуляется числитель.

При $\omega \sim \pm t$

$$\gamma = 2\pi t (\omega \mp t) \frac{-1 + \frac{1}{3} \Gamma(t) U_0 U_1 \left(1 \mp \frac{U_1}{3t} \right)}{\left(1 \mp \frac{U_1}{3t} \right) \left(-U_0 \mp \frac{U_1}{3t} (\pm t - U_0) \right)}, \quad (114)$$

что также стремится к нулю. Аналогичное показывается для $\omega \sim \pm 3t$.

Исследуем теперь вопрос об обнулении числителя. Получаем уравнение:

$$\Gamma(\omega) = \frac{3t^2}{\omega^2 U_0 U_1} \frac{1}{1 - \omega \frac{U_1}{3t^2}}. \quad (115)$$

Чтобы это условие выполнялось, нужно, чтобы это уравнение примерно выполнялось на решении уравнения на энергии.

Рассмотрим р-состояния. Для них значение γ аналогично:

$$\gamma \approx \frac{\Im(\lambda\theta\mathcal{D}^*)}{\Re(\lambda\theta\mathcal{D}^*)}. \quad (116)$$

Так же как и в случае s-состояний, это значение мало по величине в окрестностях нулей числителя (в частности, точки 0) и особых точек знаменателя, которые находятся в точках $\pm t$, $\pm 3t$.

Условие (109) отсекает нули числителя, кроме того, что находится в центре зоны, но работает для всех остальных случаев.

3.3.3 Поиск резонансов

Рассмотрим сначала s-состояния при энергиях, близких к нулю. Уравнение на резонансы:

$$\begin{aligned} & \left(\omega^2 \Gamma^2(\omega) + \frac{\pi^2}{4} \nu^2(\omega) \right) \left(1 - \omega \frac{U_1}{3t^2} \right) \left(-\frac{U_1}{3t^2} \omega^2 - U_0 \left(1 - \omega \frac{U_1}{3t^2} \right) \right) + \\ & + \Gamma(\omega) \omega \left(2 \left[\frac{U_1}{3t^2} \right]^2 \omega (U_0 - \omega) + 1 - \frac{U_0 U_1}{3t^2} \right) + \\ & + \frac{U_1}{3t^2} \left(\frac{U_1}{3t^2} (\omega - U_0) + 1 \right) = 0. \quad (117) \end{aligned}$$

Исследуем, возможно ли существование резонансов при малых энергиях. Если они существуют, то

$$0 \approx \Gamma(\omega) \omega \left(1 - \frac{U_0 U_1}{3t^2} \right) + \frac{U_1}{3t^2} \left(1 - \frac{U_0 U_1}{3t^2} \right), \quad (118)$$

откуда получаем, что

$$\omega \log \frac{|\omega|}{t} \approx -\frac{\pi}{2\sqrt{3}} U_1. \quad (119)$$

Если $Q(x)$ – такая функция, для которой $Q(x) \log Q(x) = x$ и $Q(0) = 0$, то

$$\omega = -tQ \left(-\frac{\pi|U_1|}{2\sqrt{3}t} \right). \quad (120)$$

Условие существования этого решения:

$$|U_1| \ll t. \quad (121)$$

Пусть теперь $\omega \sim \pm t$. Тогда

$$0 \approx \frac{\pi^2}{4} \nu^2(\omega) \left(1 - \omega \frac{U_1}{3t^2}\right) \left(-\frac{U_1}{3t^2} \omega^2 - U_0 \left(1 - \omega \frac{U_1}{3t^2}\right)\right) + \frac{U_1}{3t^2} \left(\frac{U_1}{3t^2} (\omega - U_0) + 1\right). \quad (122)$$

Отсюда получаем, что

$$\nu^2(\omega) \approx -\frac{4}{\pi^2} \frac{\frac{U_1}{3t^2} \left(\frac{U_1}{3t^2} (\pm t - U_0) + 1\right)}{\left(1 \mp \frac{U_1}{3t}\right) \left(-\frac{U_1}{3} - U_0 \left(1 \mp \frac{U_1}{3t}\right)\right)} \quad (123)$$

Если $|U_0|, |U_1| \gg t$, то это уравнение не имеет решений. В обратном же случае

$$\nu(\omega) \approx -\frac{1}{2\pi^2 t} \log \left| \frac{\omega}{t} \mp 1 \right| \approx \frac{2}{\pi t} \frac{1}{\sqrt{1 + 3\frac{U_0}{U_1}}}. \quad (124)$$

Отсюда

$$|\omega \mp t| \approx t \exp \left(-\frac{4\pi}{\sqrt{1 + 3\frac{U_0}{U_1}}} \right). \quad (125)$$

Таким образом, мы получили четыре резонансных состояния. Условия их существования:

$$|U_1| < |U_0| \ll t. \quad (126)$$

Подумаем, имеют ли эти состояния какой-либо смысл. Их локализация по энергиям:

$$|\gamma| \approx 2\pi t |\delta\omega| \frac{1}{-U_0 \mp U_1/3} \quad (127)$$

Экспонента принимает значения, не меньшие 0.05. Отсюда видим, что у нас не получится сделать $|\gamma|$ малым, и пики будут слишком размазанными. Следовательно, эти точки не являются резонансами.

Теперь исследуем случай $\omega \sim \pm 3t$. Уравнение на состояния в этом случае имеет вид

$$0 \approx 9t^2 \Gamma^2(\omega) \left(1 \mp \frac{U_1}{t}\right) \left(-3U_1 - U_0 \left(1 \mp \frac{U_1}{t}\right)\right) \pm \pm 3t \Gamma(\omega) \left(\pm \frac{2U_1^2}{3t^3} (U_0 \mp 3t) + 1 - \frac{U_0 U_1}{3t^2}\right) + \frac{U_1}{3t^2} \left(\frac{U_1}{3t^2} (\pm 3t - U_0) + 1\right). \quad (128)$$

Если потенциальная яма глубокая, то

$$0 \approx 9\Gamma^2(\omega)t^4 + 2\Gamma(\omega)t^2 - \frac{1}{9}. \quad (129)$$

Это значит, что

$$\Gamma(\omega)t^2 \approx -\frac{1 \pm \sqrt{2}}{9} \quad (130)$$

Подходит только положительный корень:

$$\delta\omega \approx t \exp\left(-4\sqrt{3}\pi \frac{\sqrt{2}-1}{9}\right). \quad (131)$$

Видим, что эти резонансы не подходят, поскольку сильно размазаны по энергиям.

Путь теперь яма, наоборот, мелкая. Тогда

$$\Gamma(\omega) \approx \mp \frac{1}{3t(-3U_1 - U_0)}, \quad (132)$$

то есть состояние может быть только у нижнего края зоны (так как $\Gamma(\omega)$ положительная). Получаем, что

$$\delta\omega \approx t \exp\left(-\frac{4\pi\sqrt{3}t}{3(-3U_1 - U_0)}\right). \quad (133)$$

Это состояние, в отличие от предыдущего, мало размазано по энергиям:

$$\gamma \approx -\frac{\pi\delta\omega}{2} \frac{U_0U_1}{(U_0 + 3U_1)t}. \quad (134)$$

Это значит, что нам нужно будет исследовать, насколько оно размазано по пространству.

Рассмотрим теперь р-состояния. Уравнение на них имеет вид

$$\Re\theta\Re\lambda\Re\mathcal{D} - \Im\theta\Im\lambda\Re\mathcal{D} + \Re\theta\Im\lambda\Im\mathcal{D} + \Im\theta\Re\lambda\Im\mathcal{D} = 0. \quad (135)$$

Опять по порядку рассмотрим различные значения для ω .

Если $\omega \approx 0$, то условие распадается на условия $\Re\theta = 0$, $\Re\lambda = 0$, $\Re\mathcal{D} = 0$. Первое из них приводит к уравнению

$$t^2\Gamma(\omega) \approx \frac{2t^2}{3U_1\omega}, \quad (136)$$

откуда

$$\omega \log \frac{|\omega|}{t} \approx \frac{\pi t^2}{\sqrt{3}U_1}. \quad (137)$$

Это значит, что решение имеет вид

$$\omega \approx tQ \left(\frac{\pi t}{\sqrt{3}U_1} \right). \quad (138)$$

Это решение существует только тогда, когда $t \ll |U_1|$.

Пусть теперь $\Re\lambda = 0$. Это значит, что

$$0 \approx -3 - \frac{U_1\omega}{t^2}. \quad (139)$$

Отсюда

$$\omega \approx -\frac{3t^2}{U_1}. \quad (140)$$

Так же, как и в прошлом случае, это решение присутствует только в глубоких ямах.

Теперь пусть $\Re\mathcal{D} = 0$. Тогда

$$0 \approx \Gamma(\omega) \frac{\omega}{t} (18t^2 + 9U_1\omega) + U_0 \frac{1}{3t \left(-\frac{U_1U_0}{3t^2} + 1 - U_0\omega\Gamma(\omega) + \omega \frac{U_1}{3t^2} \right)} \times \\ \times \left(6 - \frac{U_1\omega}{t^2} - 9U_1\omega\Gamma(\omega) \right). \quad (141)$$

Это значит, что

$$\omega \log \frac{|\omega|}{t} \approx \frac{\pi t^2 \sqrt{3}}{9(U_1 - 2t^2/U_0)}. \quad (142)$$

Если $|U_0|, |U_1| \gg t$, то

$$\omega \approx tQ \left(\frac{\pi t \sqrt{3}}{9U_1} \right). \quad (143)$$

В случае же, когда $|U_0|, |U_1| \ll t$, верно

$$\omega \approx -tQ \left(\frac{\pi \sqrt{3}U_0}{18t} \right). \quad (144)$$

Пусть теперь $\omega \approx \pm t$. Сначала исследуем случай $|U_0|, |U_1| \gg t$. В этом случае

$$\lambda \approx \mp \frac{U_1}{t} (1 - t^2\Gamma(\omega)), \quad (145)$$

$$\theta \approx \pm \frac{U_1}{t} (-1 - 8t^2\Gamma(\omega)), \quad (146)$$

$$\mathcal{D} \approx \frac{U_1}{t} - 8t^3 U_1 \Gamma^2(\omega) \pm 7U_1 t \Gamma(\omega) \pm (1 + 8t^2 \Gamma(\omega))(1 - t^2 \Gamma(\omega)). \quad (147)$$

Уравнение $\Re(\lambda \theta \mathcal{D}^*) = 0$ тогда сводится к виду

$$\begin{aligned} & -8t^2 U_1^2 (\Im \Gamma(\omega))^2 (8t^3 U_1 (\Im \Gamma(\omega))^2 \pm 8t^4 (\Im \Gamma(\omega))^2) - \\ & - U_1^2 (-8(U_1 \pm t)t^3 \Gamma(\omega) \Im \Gamma(\omega) \pm 7(U_1 + t)t \Im \Gamma(\omega)) \times \\ & \times [8(1 - t^2 \Gamma(\omega)) \Im \Gamma(\omega) - \Im \Gamma(\omega)(1 + 8t^2 \Gamma(\omega))] \approx 0. \end{aligned} \quad (148)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} & -64t^4 (\Im \Gamma(\omega))^2 (U_1 \pm t) - \\ & - (-8(U_1 \pm t)t^2 \Gamma(\omega) \pm 7(U_1 + t)) [7 - 16t^2 \Gamma(\omega)] \approx 0. \end{aligned} \quad (149)$$

В итоге,

$$\Im \Gamma(\omega) \approx \frac{1}{8t^2} \sqrt{(8t^2 \Gamma(\omega) \mp 7) [7 - 16t^2 \Gamma(\omega)]}. \quad (150)$$

Возможные решения этого уравнения не будут локализованы по энергиям, так как его правая часть порядка единицы.

С другой стороны, пусть $|U_0|, |U_1| \ll t$. Тогда

$$\lambda \approx -3 \pm U_1 t \Gamma(\omega), \quad (151)$$

$$\theta \approx 6 \mp 8U_1 t \Gamma(\omega), \quad (152)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{D} \approx & \frac{U_1}{t} - 8t^3 U_1 \Gamma^2(\omega) \pm 18t^2 \Gamma(\omega) - \\ & - U_0 (-1 + t^2 \Gamma(\omega)) (6 \mp 8U_1 t \Gamma(\omega)) \frac{\frac{1}{3t}(1 - t^2 \Gamma(\omega))}{1 \mp (\frac{U_1}{3} + U_0) t \Gamma(\omega)}. \end{aligned} \quad (153)$$

Отсюда получаем уравнение на энергию. Сокращая простые и длинные выкладки, получим, что это уравнение не имеет корней.

Теперь, наконец, пусть $\omega \sim \pm 3t$. Тогда

$$\lambda \approx -3 \pm 27U_1 t \Gamma(\omega), \quad (154)$$

$$\theta \approx 6 - \frac{U_1 \omega}{t^2}, \quad (155)$$

$$\mathcal{D} \approx \pm 27t \Gamma(\omega) (2t \mp 3U_1) + \left(2 \mp \frac{U_1}{t}\right) \frac{27t^3 U_0 \Gamma(\omega)}{\mp t U_0 - U_1 (\pm 3t - U_0)}. \quad (156)$$

Обнуление $\Re(\lambda\theta\mathcal{D}^*)$ тогда следует из обнуления действительной части каждой из этих функций. Уравнение $\Re\lambda = 0$ не дает корней, $\Re\lambda = 0$ приводит к корню

$$\delta\omega \approx t \exp\left(\frac{4\pi\sqrt{3}t}{9U_1}\right) \quad (157)$$

у верхнего края зона, а условие $\Re\mathcal{D} = 0$ переписывается в виде

$$0 \approx \pm\Gamma(\omega) + \frac{tU_0\Gamma(\omega)}{\mp tU_0 - U_1(\pm 3t - U_0)} \quad (158)$$

и тоже не имеет решений.

3.3.4 Исследование локализации резонансов

В этом разделе нам нужно понять, какие из найденных резонансов удовлетворяют условию локализации на небольшом количестве узлов, в котором они и были найдены. Для этого рассмотрим точное выражение для функций Грина, выраженных через беспримесные функции Грина и $\Gamma(\omega)$. Выпишем общую формулу для них:

$$\begin{aligned} G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta} = & G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta} + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 G_{\delta\mathbf{m}}^{(0)R\beta} + \\ & + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0 \frac{\Delta_1}{\Delta} U_0 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0 \frac{\Delta_2}{\Delta} U_1 \sum_{\delta} G_{\delta\mathbf{m}}^{(0)R\beta} + \\ & + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\Delta_2}{\Delta} U_0 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\gamma_1}{\gamma_0} U_1 G_{\delta\mathbf{m}}^{(0)R\beta} + \\ & + \sum_{\delta \neq \delta'} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_0} U_1 G_{\delta'\mathbf{m}}^{(0)R\beta}. \quad (159) \end{aligned}$$

В случае s-состояний, нам нужно исследовать, как эти функции меняются по отношению к функциям нулевого узла, а в случае p-состояний – по отношению и функциям его ближайших соседей.

Мы рассмотрим условия на примере s-состояний, понимая, что в слу-

чае p -состояний всё в достаточной мере аналогично. В данном случае

$$\begin{aligned}
\frac{G_{\mathbf{nm}}^{\alpha\beta}}{G_{00}^{LL}} &= G_{\mathbf{nm}}^{(0)\alpha\beta} \frac{\Delta}{\Delta_1} + \\
&+ G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} \frac{\Delta}{\Delta_1} + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 G_{\mathbf{\delta m}}^{(0)R\beta} \frac{\Delta}{\Delta_1} + \\
&+ G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0^2 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} + G_{\mathbf{n0}}^{(0)\alpha L} U_0 \frac{\Delta_2}{\Delta_1} U_1 \sum_{\delta} G_{\mathbf{\delta m}}^{(0)R\beta} + \\
&+ \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\Delta_2}{\Delta_1} U_0 G_{\mathbf{0m}}^{(0)L\beta} + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\gamma_1}{\gamma_0} \frac{\Delta}{\Delta_1} U_1 G_{\mathbf{\delta m}}^{(0)R\beta} + \\
&+ \sum_{\delta \neq \delta'} G_{\mathbf{n\delta}}^{(0)\alpha R} U_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_0} \frac{\Delta}{\Delta_1} U_1 G_{\mathbf{\delta' m}}^{(0)R\beta}. \quad (160)
\end{aligned}$$

Чтобы это отношение спадало при удалении узлов от центра, нужно, чтобы беспримесные функции на довольно небольшом удалении от центра уже были малы (в том числе, по сравнению с U_0, U_1) и Δ/Δ_1 была мала. Последнее является следствием того факта, что мы рассматриваем функции Грина в резонансе, где они чисто мнимы и велики по модулю. Первое же условие нужно исследовать отдельно.

Рассмотрим беспримесные функции Грина, содержащие узлы одного типа (то есть LL или RR). Если узлы не совпадают, то для них верно, что

$$\begin{aligned}
G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta}(\omega) &= V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{w}(\mathbf{r}_m^\beta - \mathbf{r}_n^\beta)} \frac{\omega}{(\omega + i0)^2 - \varepsilon^2(\mathbf{w})} = \\
&= \int_{-3t}^{3t} d\varepsilon \frac{\nu(\varepsilon)}{2} \frac{\langle e^{i\mathbf{w}(\mathbf{r}_m^\beta - \mathbf{r}_n^\beta)} \rangle_{\varepsilon}}{\omega - \varepsilon + i0}. \quad (161)
\end{aligned}$$

Здесь усреднение проводится по волновым векторам, лежащим на некоторой изоэнергитической поверхности. Пользуясь выражениями для спектра в различных областях, которые были выписаны выше, получим, что при $|\omega| \ll t$ изоэнергитические поверхности образуют две окружности с центрами в точках Дирака, а у краев зоны – окружность с центром в нуле. В первом случае получаем, что

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta}(\omega) \approx -i \frac{\sqrt{3}}{3t^2} |\omega| \cos((y_m^\beta - y_n^\beta) w_D) H_0^\pm \left(\frac{|\omega|}{v_f} |\mathbf{r}_m^\beta - \mathbf{r}_n^\beta| \right), \quad (162)$$

а во втором – что

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta}(\omega) \approx -\frac{\sqrt{3}i}{2t} H_0^\mp \left(\sqrt{2 \left(1 - \frac{|\omega|}{3t} \right)} \frac{|\mathbf{r}_m^\beta - \mathbf{r}_n^\beta|}{a} \right), \quad (163)$$

где $H_0^\pm(x)$ – первая и вторая функции Ганкеля. Верхний знак выбирается при $\omega > 0$ и наоборот.

Функции, связывающие разные узлы, можно записать как

$$G_{\mathbf{nm}}^{(0)\bar{\beta}\beta}(\omega) = -\frac{t}{\omega} \sum_{\langle \mathbf{p} \rangle} G_{\mathbf{pm}}^{(0)\beta\beta}(\omega), \quad (164)$$

где сумма берется по всем соседям \mathbf{n} .

Рассмотрим в случае малых энергий, насколько велики беспримесные функции, соединяющие два узла. С одной стороны, при малых аргументах, которые для нас и важны, функции Ганкеля ведут себя как логарифм, который является медленно спадающей по модулю функцией. С другой стороны, можно надеяться, что функции будут достаточно малы по другой причине.

В самом деле, функции, соединяющие узлы одного типа, малы, так как содержат малый множитель $|\omega|$. В самом деле,

$$|G_{\mathbf{nm}}^{(0)\beta\beta}(\omega)| \lesssim \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t^2} |\omega| \log \frac{|\omega|}{t}. \quad (165)$$

Функции, соединяющие узлы разного типа, подобного множителя не содержат, но они также могут оказаться малыми. Чтобы понять это, обратим внимание на косинус, содержащийся в функции в качестве множителя. Если разбить решетку на слои вдоль оси y , то значения косинуса будут чередоваться с периодом в три слоя, принимая при этом значения $1, -1/2, -1/2$. Это значит, что сумма коэффициентов перед логарифмами в сумме, образующей функцию Грина для разных типов атомов, будет равна нулю. Кроме того, если расстояния между атомами, по которым берется сумма, и фиксированным атомом \mathbf{m} обозначить как $r_i, i = 1, 2, 3$, то выражение $\log r_1 - (1/2) \log r_2 - (1/2) \log r_3$ спадает при увеличении этих расстояний, поскольку отношение любых двух из них стремится к единице.

Таким образом, оценить сверху модуль беспримесной функции можно, рассмотрев функцию для наиболее близких интересующих нас узлов, а именно, узлов, которые являются третьими соседями друг друга. Рассмотрим этот случай:

$$G_{3\delta,0}^{(0)R,L}(\omega) \approx \mp \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t} \log \left(\frac{3}{\sqrt{\sqrt{3}} \times \sqrt{3}/2} \right) = \mp \frac{\sqrt{3}}{3\pi t} \log 6 \approx \\ \approx 0.14... \times \frac{1}{t}. \quad (166)$$

Видим, что коэффициент в этой функции порядка единицы, и не зависит от глубины потенциала. Также в формулы для функций Грина могут войти $G_{\delta 0}^{(0)RL}(\omega) \approx 1/(3t)$ и другие функции такого типа.

Мы видим, что по порядку величины беспримесные функции Грина совпадают с теми, которые были получены для нулевого узла. Изучим выражение

$$G_{\mathbf{n}0}^{LL} = G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL} + G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL}U_0G_{00}^{LL} + \sum_{\delta} G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR}U_1G_{\delta 0}^{RL}. \quad (167)$$

Для изучаемого состояния верно, что

$$\Gamma(\omega)\omega \approx -\frac{U_1}{3t^2} + \frac{2U_0U_1^2}{9t^4} + \dots \quad (168)$$

Отсюда

$$\frac{G_{\mathbf{n}0}^{LL}}{G_{00}^{LL}} \approx \frac{3t^2}{2U_0U_1} \cos(w_D y_{\mathbf{n}}) - \frac{3t^3}{2U_0U_1} \frac{2\sqrt{3}}{3\pi t} \sum_{\delta} \log(\dots). \quad (169)$$

Видим, что при небольших расстояниях функции Грина не только не уменьшаются с увеличением его, но, наоборот, растут. Понятно, что данное состояние нельзя считать локализованным.

Рассмотрим р-состояние в мелкой яме. Мы знаем, что

$$\omega\Gamma(\omega) \approx -\frac{U_0}{9t^2}. \quad (170)$$

Исследуем уравнение

$$\frac{G_{\mathbf{n}\delta}^{LR}}{G_{\delta\delta}^{RR}} \approx G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL} U_0 \frac{\Delta_2}{\Delta} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} U_1 + \sum_{\delta' \neq \delta} G_{\mathbf{n}\delta'}^{(0)LR} U_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_1}. \quad (171)$$

С учетом того, что яма мелкая, получаем, что

$$\frac{\Delta_2}{\Delta} = \left(\frac{U_1}{t} (\omega - U_0) + \frac{3t(1 - U_0\omega\Gamma(\omega))}{1 - \omega^2\Gamma(\omega)} \right)^{-1} \approx \frac{1}{3t}, \quad (172)$$

$$\frac{\gamma_2}{\gamma_1} = -\frac{\mathcal{B}}{\mathcal{D}} \approx \frac{\frac{U_0}{t} + \frac{2U_0}{t}}{-\frac{2U_0}{t} + \frac{2U_0}{t}} \gtrsim \frac{t}{U_1}, \quad (173)$$

$$\frac{\gamma_0}{\gamma_1} = -\frac{t\lambda\theta}{\mathcal{D}} \approx 18t \left(-\frac{2U_0}{t} + \frac{2U_0}{t} \right)^{-1} \gtrsim \frac{t^3}{U_0U_1}. \quad (174)$$

В двух последних формулах взят первый следующий порядок после сократившегося.

Снова видим, что правая часть уравнения резко возрастает при удалении узла от центрального. На самом деле, это весьма логично. Это резонансное состояние получается при обнулении действительной части числителя, когда мнимая часть знаменателя почти не существует. В этом смысле, мы получаем не максимум плотности состояний, а минимум. Следовательно, такие состояния можно отбрасывать. Эти рассуждения мы применим, к состояниям, которые получаются аналогичным образом для глубокой ямы.

Теперь рассмотрим два оставшихся состояния у центра в глубокой яме. Сначала пусть $\Re\theta = 0$. Это приводит к корню

$$\omega\Gamma(\omega) = \frac{2}{3U_1} - \frac{1}{9t}Q\left(\frac{\pi t}{\sqrt{3}U_1}\right) + \dots \quad (175)$$

Тогда

$$\frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{t}{U_1U_0}, \quad (176)$$

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_0} = -\frac{\mathcal{D}}{t\lambda\theta} \approx \frac{4}{\Im\theta}, \quad (177)$$

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_2} = -\frac{\mathcal{D}}{\mathcal{B}} \approx 2. \quad (178)$$

Рассмотрим опять

$$\frac{G_{\mathbf{n}\delta}^{LR}}{G_{\delta\delta}^{RR}} \approx G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL} U_0 \frac{\Delta_2}{\Delta} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} U_1 + \sum_{\delta' \neq \delta} G_{\mathbf{n}\delta'}^{(0)LR} U_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_1}.$$

Теперь можем считать, что

$$\frac{G_{\mathbf{n}\delta}^{LR}}{G_{\delta\delta}^{RR}} \approx G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} U_1 + 2U_1 \sum_{\delta' \neq \delta} G_{\mathbf{n}\delta'}^{(0)LR}.$$

Видим, что на небольших расстояниях это отношение большое. Следовательно, состояние не локализовано.

Наконец, пусть $\Re\lambda \approx 0$. Корень соответствует уравнению

$$\omega = -\frac{3t^2}{U_1}(1 + \omega^2\Gamma(\omega)) + \dots \approx -\frac{3t^2}{U_1} - \frac{18\sqrt{3}t^4}{\pi U_1^3} \log\left(\frac{3t^2}{|U_1|}\right). \quad (179)$$

Заметим, что этим уравнением можно пользоваться, поскольку само оно задано с точностью $\sim \omega^3\Gamma(\omega)$.

Теперь

$$\frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{t}{U_0 U_1}, \quad (180)$$

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_0} = -\frac{\mathcal{D}}{\lambda \theta t} \approx -\frac{1}{t \Im \lambda (9t^2 \Gamma(\omega))} \left(\frac{3t^3}{U_1} \Gamma(\omega) - \frac{9t^3 \Gamma(\omega)}{U_1} \right) \approx \frac{2}{3U_1 \Im \lambda}, \quad (181)$$

$$\frac{\gamma_1}{\gamma_2} \approx \frac{\frac{3t^3}{U_1} - \frac{9t^3}{U_1}}{-\frac{9t^3}{U_1} + 27\frac{t^3}{U_1}} = -\frac{1}{3}. \quad (182)$$

Снова считаем, что

$$\frac{G_{\mathbf{n}\delta}^{LR}}{G_{\delta\delta}^{RR}} \approx G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL} U_0 \frac{\Delta_2}{\Delta} \frac{\gamma_0}{\gamma_1} + G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} U_1 + \sum_{\delta' \neq \delta} G_{\mathbf{n}\delta'}^{(0)LR} U_1 \frac{\gamma_2}{\gamma_1}.$$

Получим

$$\frac{G_{\mathbf{n}\delta}^{LR}}{G_{\delta\delta}^{RR}} \approx G_{\mathbf{n}\delta}^{(0)LR} U_0 - \frac{3t}{2} G_{\mathbf{n}0}^{(0)LL} \Im \lambda - 3U_1 \sum_{\delta' \neq \delta} G_{\mathbf{n}\delta'}^{(0)LR}. \quad (183)$$

Снова понимаем, что состояния локализовать невозможно.

Для состояний, лежащих у края зоны, беспримесные функции Грина практически не зависят от расстояния до центрального атома при небольших удалениях от него. Это показывает, что в любых выражениях типа (167) правая часть практически не будет зависеть от расстояния. Это значит, что состояния у края зоны локализованными быть не могут.

3.4 Промежуточные результаты

Исследовав уравнения (46), (59), (60) для энергий, лежащих вне непрерывного спектра, мы показали, что энергии, приведенные ниже, удовлетворяют этим уравнениям:

$$E_1 \approx U_0 + \frac{3t^2 U_0 + U_1}{U_1 U_0 - U_1}, \quad (184)$$

$$E_2 \approx -3t - e^{-\frac{4\sqrt{3}}{9}\pi t}, \quad (185)$$

$$E_3 \approx U_1 + 5\frac{t^2}{U_1}, \quad (186)$$

$$E_4 \approx U_1 + 2\frac{t^2}{U_1}. \quad (187)$$

Кроме того, было установлено, что необходимое и достаточное условие того, чтобы состояния были локализованы в пространстве, записывается как $|\omega| \gg 3t$. Среди найденных решений только второе никогда не удовлетворяет этому условию. Первое решение является приемлимым, если

$$|U_0| \gg 3t, \quad |U_0 - U_1| \sim |U_0|, \quad (188)$$

а третье и четвертое – если

$$|U_1| \gg 3t. \quad (189)$$

Внутри непрерывного спектра существует возможность существования почти связанных состояний, или резонансов. В упрощенной задаче, рассмотренной нами, существует ряд резонансных состояний при различных энергиях. С другой стороны, как показали вычисления, не одно из них не является локализованным на небольшом количестве узлов, и, следовательно, рассмотренное приближение к ним не применимо. С другой стороны, был найден механизм, который, в принципе, мог локализовать резонанс на небольших расстояниях.

Существует вероятность, что численное рассмотрение этой задачи принесет более продуктивный результат.

4 Слабо локализованные состояния

4.1 Уравнения для слабо локализованных состояний

На странице 6 было показано, что уравнение Дайсона для решетки графена можно записать в виде (24):

$$(G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} G_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}(\omega) = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}') + V \int_{B.Z.} \frac{d^2 \mathbf{w}_1}{(2\pi)^2} \tilde{U}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}_1} G_{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}'}(\omega).$$

где

$$(G_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} = \begin{pmatrix} \omega & R_{L, \mathbf{w}} e^{i\omega \mathbf{d}} \\ R_{R, \mathbf{w}} e^{-i\omega \mathbf{d}} & \omega \end{pmatrix},$$

$$\tilde{U}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}_1} = \sum_{\mathbf{p}} e^{-i(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w}) \mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix}.$$

В силу некоторых причин, нам удобнее рассматривать вместо этого уравнение на

$$\tilde{G}_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}(\omega) = T^{-1}(\mathbf{w}) G_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}(\omega) T(\mathbf{w}'), \quad (190)$$

где

$$T(\mathbf{w}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\mathbf{w}\mathbf{d}} \end{pmatrix}. \quad (191)$$

Оно имеет вид

$$(\tilde{G}_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} \tilde{G}_{\mathbf{w},\mathbf{w}'}(\omega) = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}') + V \int_{B.Z.} \frac{d^2\mathbf{w}_1}{(2\pi)^2} \hat{U}_{\mathbf{w},\mathbf{w}_1} \tilde{G}_{\mathbf{w}_1,\mathbf{w}'}(\omega).$$

где

$$\begin{aligned} (\tilde{G}_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1} &= \begin{pmatrix} \omega & R_{L,\mathbf{w}} \\ R_{R,\mathbf{w}} & \omega \end{pmatrix}, \\ \hat{U}_{\mathbf{w},\mathbf{w}_1} &= \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) e^{-i(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L} & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) e^{-i(\mathbf{w}_1 - \mathbf{w})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

В двух частных случаях матрица $(\tilde{G}_{\mathbf{w}}^{(0)}(\omega))^{-1}$ значительно упрощается. В первом случае

$$\mathbf{w} = s\mathbf{w}_D + \mathbf{k}, \quad |\mathbf{k}| \ll \frac{t}{v_f} \quad (192)$$

$$\mathbf{w}_D = \begin{pmatrix} 0; \frac{4\sqrt{3}\pi}{9a} \end{pmatrix}^T, \quad s = \pm 1. \quad (193)$$

Тогда

$$(\tilde{G}_{s\mathbf{w}_D + \mathbf{k}}^{(0)}(\omega))^{-1} \approx (G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega))_s^{-1} = \begin{pmatrix} \omega & v_f(-i; -s)\mathbf{k} \\ v_f(i; -s)\mathbf{k} & \omega \end{pmatrix}, \quad (194)$$

где $v_f = \frac{3}{2}ta$.

Введем теперь матричную функцию $G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s(\omega)$, которая удовлетворяет уравнению

$$(G_{\mathbf{k}}^{(0)}(\omega))_s^{-1} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s(\omega) = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') + \int \frac{d^2\mathbf{k}_1}{(2\pi)^2} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} G_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}^s(\omega). \quad (195)$$

Здесь интегрирование ведется по всему пространству, а

$$U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} = V \hat{U}_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} = V \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L} & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) e^{-i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R} \end{pmatrix}. \quad (196)$$

Мы видим, что функция $G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^s$ в достаточной мере хорошо аппроксимирует функцию $G_{s\mathbf{w}_D + \mathbf{k}, s\mathbf{w}_D + \mathbf{k}'}$, если она быстро спадает при увеличении

$|\mathbf{k}|$ и $|\mathbf{k}'|$. В самом деле, если интеграл набирается внутри зоны Бриллюэна, то нет большой разницы, брать ли его по всему пространству или только по его части. Кроме того, нужно понимать, что решение имеет смысл только при небольших импульсах, при которых работает приближение, то есть тогда, когда $|\mathbf{k}| \ll t/v_f$. Следовательно, интеграл должен набираться уже на этих масштабах.

Перейдем теперь к координатной форме уравнения (195), считая, что

$$G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s(\omega) = \frac{1}{V} \int d^2\mathbf{r}d^2\mathbf{r}' G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}') e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{k}'\mathbf{r}')}, \quad (197)$$

и, как следствие,

$$G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = V \int \frac{d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s(\omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{k}'\mathbf{r}')}. \quad (198)$$

Если мы возьмем оператор

$$(G^{(0)})_s^{-1} = \begin{pmatrix} \omega & v_f(-i; -s)(-i\nabla) \\ v_f(i; -s)(-i\nabla) & \omega \end{pmatrix}, \quad (199)$$

то окажется, что

$$(G^{(0)})_s^{-1} G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = V \int \frac{d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'}{(2\pi)^4} (G_{\mathbf{k}}^{(0)})_s^{-1} G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s(\omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{k}'\mathbf{r}')}. \quad (199)$$

Тогда

$$(G^{(0)})_s^{-1} G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + V \int \frac{d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'d^2\mathbf{k}_1}{(2\pi)^6} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1} G_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}^s(\omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{k}'\mathbf{r}')}. \quad (199)$$

Последнее слагаемое равно

$$\begin{aligned} & V^2 \sum_{\mathbf{p}} \int \frac{d^2\mathbf{k}d^2\mathbf{k}'d^2\mathbf{k}_1}{(2\pi)^6} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L} & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k})\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R} \end{pmatrix} \times \\ & \times G_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}^s(\omega) e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\mathbf{k}'\mathbf{r}')} = V^2 \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix} \times \\ & \times \int \frac{d^2\mathbf{k}'d^2\mathbf{k}_1}{(2\pi)^4} G_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}^s(\omega) e^{-i(\mathbf{k}'\mathbf{r}'-\mathbf{k}_1\mathbf{r})} = \tilde{U}(\mathbf{r}) G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega), \end{aligned}$$

где

$$\tilde{U}(\mathbf{r}) = V \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix}. \quad (200)$$

Тогда уравнение записывается в виде

$$(G^{(0)})_s^{-1}G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) - \tilde{U}(\mathbf{r})G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (201)$$

Когда мы найдем решения этого уравнения, нужно будет проверить их на применимость. В координатном представлении условие будет применимо, если у функций Грина не будет существенных изменений на масштабах порядка v_f/t .

Теперь рассмотрим другой частный случай задачи. При $\mathbf{w} \approx 0$ (то есть при энергиях, лежащих у края зоны) выполняется приближение

$$(\tilde{G}_{\mathbf{w}}^{(0)})^{-1} \approx (\tilde{G}_{\mathbf{w}}^{(0)})^{-1} = \begin{pmatrix} \omega & 3t - \frac{3ta^2}{2}w^2 \\ 3t - \frac{3ta^2}{2}w^2 & \omega \end{pmatrix}. \quad (202)$$

Тогда приближенное уравнение на функции Грина запишется в виде

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \omega & 3t - \frac{3ta^2}{2}w^2 \\ 3t - \frac{3ta^2}{2}w^2 & \omega \end{pmatrix} G_{\mathbf{w}, \mathbf{w}'}^1(\omega) = \\ = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}') + \int \frac{d^2 \mathbf{w}_1}{(2\pi)^2} U_{\mathbf{w}, \mathbf{w}_1} G_{\mathbf{w}_1, \mathbf{w}'}^1(\omega). \end{aligned} \quad (203)$$

Это приближение для обратной матрицы применимо при $w \ll 1/a$.

В координатном представлении это запишется в виде

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \omega & 3t + \frac{3ta^2}{2}\nabla^2 \\ 3t + \frac{3ta^2}{2}\nabla^2 & \omega \end{pmatrix} G^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \\ = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + U(\mathbf{r})G^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega), \end{aligned} \quad (204)$$

где

$$\tilde{U}(\mathbf{r}) = V \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix}. \quad (205)$$

Мы рассмотрим это второе приближение в первую очередь.

4.2 Слабо связанные состояния у края зоны

Исследуем потенциал (205) задачи. Можно заметить, что его усреднение по элементарной ячейке мало отличается от усреднения от обычного кулоновского потенциала. Изучим преобразование Фурье от их разности:

$$\Delta = \int d^2 \mathbf{r} (\tilde{U}(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r})) e^{i\mathbf{w}\mathbf{r}}.$$

Первый элемент матрицы Δ можно переписать в форме

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \sum_{\mathbf{p}} \int_V d^2\mathbf{r} (VU(\mathbf{r}_{\mathbf{p}})\delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L)e^{i\mathbf{w}\mathbf{r}} - U(-\mathbf{r}_{\mathbf{p}} + \mathbf{r})e^{i\mathbf{w}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_{\mathbf{p}})}) = \\ &= \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \int_V d^2\mathbf{r} (U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}) - U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r})e^{i\mathbf{w}\mathbf{r}}).\end{aligned}$$

В пределах малых $|\mathbf{w}|$, когда у нас работает приближение,

$$\begin{aligned}|\Delta_1| &= \left| \sum_{\mathbf{p}} e^{-i\mathbf{w}\mathbf{r}_{\mathbf{p}}} \int_V d^2\mathbf{r} (U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}) - U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r}) + U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r}) - U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r})e^{i\mathbf{w}\mathbf{r}}) \right| \leq \\ &\leq \sum_{\mathbf{p}} \int_V d^2\mathbf{r} |U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}) - U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r})| + \\ &+ 2 \sum_{\mathbf{p}} \int_V d^2\mathbf{r} |U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}} - \mathbf{r})| \sin\left(\frac{1}{2}\mathbf{w}\mathbf{r}\right) \leq \sum_{\mathbf{p}} (M_{\mathbf{p}}^1 + M_{\mathbf{p}}^0 wa),\end{aligned}\quad (206)$$

где N – число частиц, $M_{\mathbf{p}}^1$ – максимальное отклонение потенциала внутри ячейки, $M_{\mathbf{p}}^0$ – максимальное значение потенциала. Таким образом,

$$|\Delta_1| \lesssim \frac{Ze^2}{a} \left(\log \frac{L}{a} + Lw \right),\quad (207)$$

где L – характерный размер образца графена.

Это значит, что если Z достаточно мало, то в пределах нашего приближения потенциал неотличим от кулоновского, за тем исключением, что он должен в нуле быть выведен на U_0 , а не на бесконечность.

Аналогичные вычисления можно произвести для второго элемента матрицы.

Таким образом, мы можем в некотором приближении вместо задачи (204) решать

$$(\omega - \hat{L})G^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \begin{pmatrix} \omega - U(r) & 3t + \frac{3ta^2}{2}\nabla^2 \\ 3t + \frac{3ta^2}{2}\nabla^2 & \omega - U(r) \end{pmatrix} G^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').\quad (208)$$

Заметим, что эта новая задача, в отличие от предыдущей, является сферически симметричной. Это значит, что оператор \hat{L} коммутирует с оператором момента импульса, и все его собственные функции имеют определенный момент. Это значит, что функцию Грина можно предста-

вить в виде

$$\begin{aligned} G^1(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \sum_{n,l} \frac{|\Psi_{n,l}(\mathbf{r})\rangle \langle \Psi_{n,l}(\mathbf{r}')|}{\omega - E_{n,l}} = \sum_{n,l} \frac{|\Psi_{n,l}(r)\rangle \langle \Psi_{n,l}(r')|}{\omega - E_{n,l}} e^{il(\phi - \phi')} = \\ &= \sum_l G_l(r, r'; \omega) e^{il(\phi - \phi')}. \end{aligned} \quad (209)$$

Вспоминаем, что

$$\nabla^2 = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

и что

$$\nabla^2 G_l(r, r'; \omega) e^{il(\phi - \phi')} = e^{il(\phi - \phi')} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right) G_l(r, r'; \omega).$$

Также нам понадобится выражение для дельта-функции в полярных координатах. Из ее определения видим, что

$$\begin{aligned} \int dr' d\phi' \tilde{F}(r', \phi') \delta(r - r') \delta(\phi - \phi') &= \tilde{F}(r, \phi) = F(\mathbf{r}) = \\ &= \int d^2 \mathbf{r}' F(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int r dr d\phi \tilde{F}(r, \phi) \delta(r, r'; \phi, \phi'), \end{aligned}$$

где $\delta(r, r'; \phi, \phi')$ есть то, во что преобразуется дельта-функция при замене координат. Отсюда

$$\delta(r, r'; \phi, \phi') = \frac{\delta(r - r') \delta(\phi - \phi')}{r}. \quad (210)$$

Теперь мы можем решать уравнение отдельно для разных l . Получаем

$$\begin{aligned} \left(\begin{array}{cc} \omega - U(r) & 3t + \frac{3ta^2}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right) \\ 3t + \frac{3ta^2}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right) & \omega - U(r) \end{array} \right) \times \\ \times G_l(r, r'; \omega) = \frac{\delta(r - r')}{2\pi r}. \end{aligned} \quad (211)$$

Теперь диагонализуем задачу. Нам понадобится ортогональная матрица S , для которой $S^{-1} \sigma_x S$ – диагонально. Мы можем убедиться, что

$$S = \begin{pmatrix} \sqrt{2}/2 & -\sqrt{2}/2 \\ \sqrt{2}/2 & \sqrt{2}/2 \end{pmatrix}, \quad S^{-1} \sigma_x S = \sigma_z. \quad (212)$$

Тогда, если

$$Q_l(r, r'; \omega) = S^{-1} G_l(r, r'; \omega) S, \quad (213)$$

то

$$\left[\left(3t + \frac{3ta^2}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right) \right) \sigma_z + \omega - U(r) \right] Q_l(r, r'; \omega) = \frac{\delta(r - r')}{2\pi r}. \quad (214)$$

Найдем несингулярные решения задачи

$$\left[\left(3t + \frac{3ta^2}{2} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l^2}{r^2} \right) \right) \sigma_z + \omega - U(r) \right] |\Psi(r)\rangle = 0, \quad (215)$$

считая, что $U(r) = -Ze^2/r$. Решение полностью аналогично нахождению собственных волновых функций водородоподобного атома (см. [8]). В результате получаем

$$\Psi_l^\pm = x^{|l|} e^{i\sqrt{2(1\pm\beta)}x} L \left(2|l|, -|l| - \frac{1}{2} \pm \frac{i\alpha}{2\sqrt{2(1\pm\beta)}}, -2i\sqrt{2(1\pm\beta)}x \right), \quad (216)$$

где

$$\alpha = \frac{2Ze^2}{3at}, \quad \beta = \frac{\omega}{3t}, \quad x = \frac{r}{a},$$

а $L(a, b, x)$ – обобщенные полиномы Лаггера.

Если $1 \pm \beta > 0$, то решения образуют непрерывный спектр и не являются локализованными, то есть не интересны нам. Если же $1 \pm \beta < 0$, то у нас имеется набор локализованных решений в точках β_n , для которых

$$-|l| - \frac{1}{2} \pm \frac{\alpha}{2\sqrt{-2(1\pm\beta_n)}} = n \in Z^+, \quad (217)$$

откуда

$$\sqrt{-2(1\pm\beta_n)} = \pm \frac{\alpha}{2n + 2|l| + 1}. \quad (218)$$

то есть

$$\beta_n = \mp 1 \mp \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(2n + 2|l| + 1)^2}, \quad (219)$$

или

$$\omega_n = \mp 3t \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(2n + 2|l| + 1)^2} \right). \quad (220)$$

Кроме того, поскольку нужно выбрать ветвь квадратного корня, для которой экспонента будет затухающей на бесконечности,

$$\pm \frac{\alpha}{2n + 2|l| + 1} \geq 0, \quad (221)$$

откуда

$$\pm \left(n + |l| + \frac{1}{2} \right) \geq 0. \quad (222)$$

Отсюда, в частности, видим, что состояния могут существовать только тогда, когда мы вибираем верхний знак. Иначе говоря, состояния отщепляются только от нижнего края зоны, но не от верхнего.

Введем новое квантовое число $m = n + |l| \in Z^+$. Тогда для заданного m момент l сможет принимать все значения от $-m$ до m , то есть порядок вырождения уровня равен $2m + 1$. Сами уровни энергии расположены в точках

$$\omega_m = -3t \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(2m + 1)^2} \right). \quad (223)$$

Волновые функции для связанных состояний запишутся как

$$\Psi_{m,l}^{\pm}(x) = x^{|l|} e^{-\frac{(2m+1)x}{\alpha}} L \left(2|l|, m - |l|, \frac{2(2|m| + 1)x}{\alpha} \right). \quad (224)$$

Замечаем, что для состояний непрерывного спектра приближение работает только при небольших значениях $\sqrt{2(1 \pm \beta)}$, поскольку иначе оно содержит большие волновые векторы. Это объясняет, почему тот факт, что в решении непрерывный спектр формально присутствует во всем спектре, не противоречит задаче.

Большой интерес представляют связанные состояния (224), поскольку исследованию их и посвящена наша задача.

Преобразование Фурье от волновой функции имеет вид разложения по функциям Бесселя:

$$\begin{aligned} \int d^2 \mathbf{r} e^{-i \mathbf{k} \mathbf{r}} f(r) e^{i l \phi} &= \int_0^{\infty} r dr \int_{-\pi}^{\pi} d\phi e^{-i k r \cos \phi + i l \phi} f(r) = \\ &= 2\pi (-i)^l \int_0^{\infty} r dr J_l(kr) f(r). \end{aligned} \quad (225)$$

Необходимо, чтобы этот интеграл быстро спадал с увеличением k . Мы можем выразить примерное условие в виде $(2m + 1)/\alpha \ll 1$.

Таким образом, мы у края зоны серию состояний с энергиями

$$\omega_m = \pm 3t \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{(2m + 1)^2} \right), \quad \alpha = \frac{2Ze^2}{3at}, \quad (226)$$

$$m \in Z^+,$$

притом каждой энергии соответствует $2m + 1$ состояние. Это выражение для энергии является применимым, если для m выполнено соотношение

$$m \ll \frac{\alpha}{2}. \quad (227)$$

Также исследуем, какой вид будут иметь функции Грина внутри непрерывного спектра. Первый диагональный элемент матрицы $Q_l(r, r', \omega)$ выражается через вырожденные гипергеометрические функции. Если $\omega = \omega' + i\gamma, \omega' > -3t, \gamma \rightarrow 0$, то

$$Q_l^1(xa, x'a, 3t\beta) = C_\beta(x') \left(\frac{x}{x'}\right)^{|l|} e^{i\sqrt{2(1+\beta)}(x-x')} \times \begin{cases} \frac{M\left(|l+\frac{1}{2}-\frac{i}{2}\frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l+1, -2ix\sqrt{2(1+\beta)}\right)}{M\left(|l+\frac{1}{2}-\frac{i}{2}\frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l+1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)}, r < r', \\ \frac{U\left(|l+\frac{1}{2}-\frac{i}{2}\frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l+1, -2ix\sqrt{2(1+\beta)}\right)}{U\left(|l+\frac{1}{2}-\frac{i}{2}\frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l+1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)}, r > r'. \end{cases} \quad (228)$$

Функции выбраны таким образом для того, чтобы у них не присутствовало сингулярности при $x \rightarrow \infty, \beta = \beta_0 + i0$. Здесь

$$(C_\beta(x'))^{-1} = 3\pi t a^2 x' \left(|l| + \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}\right) \times \left(\frac{U' \left(|l| + \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l| + 1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)}{U \left(|l| + \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l| + 1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)} - \frac{M' \left(|l| + \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l| + 1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)}{M \left(|l| + \frac{1}{2} - \frac{i}{2} \frac{\alpha}{\sqrt{2(1+\beta)}}, 2|l| + 1, -2ix'\sqrt{2(1+\beta)}\right)} \right). \quad (229)$$

Можно заметить, что

$$Q_l^1(xa, xa, 3t\beta) = C_\beta(x). \quad (230)$$

Таким образом, мы получили выражение для функций Грина. С другой стороны, непосредственное исследование их показывает, что в области, близкой к границе зоны у системы нет резонансов.

4.3 О слабо локализованных состояниях у центра зоны

В центре зоны спектр квазичастиц линейный, и уравнение на слабо локализованные функции Грина принимает вид уравнения Вейля:

$$\begin{pmatrix} \omega & v_f(-i; -s)(-i\nabla) \\ v_f(i; -s)(-i\nabla) & \omega \end{pmatrix} G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) - \tilde{U}(\mathbf{r})G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Здесь

$$\tilde{U}(\mathbf{r}) = V \sum_{\mathbf{p}} \begin{pmatrix} U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^L) & 0 \\ 0 & U(\mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \delta(\mathbf{r} + \mathbf{r}_{\mathbf{p}}^R) \end{pmatrix}.$$

Если мы ищем гладкие решения, то потенциал, так же, как и в предыдущем случае, можно заменить обычным кулоновским. Таким образом мы получим обычное уравнение Дирака для фермиона с нулевой массой в кулоновском поле. С другой стороны, известно, что подобное уравнение не может иметь связанных или резонансных состояний типа атома водорода. Это уравнение имеет решение степенного типа, сингулярное в нуле, но в обычной релятивистской квантовой механике эти решения не рассматриваются в силу своей нефизичности.

С другой стороны, в нашей задаче эти степенные решения могут иметь некоторый смысл. В самом деле, если волновые функции этих состояний спадают достаточно быстро на бесконечности, то они могут удовлетворять точной задаче, поскольку на малых масштабах у нас существует естественный радиус обрезания a .

В этом подразделе мы изучим подобные состояния и условия их образования.

4.3.1 Получение степенных решений в формальной континуальной задаче

В этой части мы проиллюстрируем возможность существования степенных решений, формально исследовал уравнение (201) при $\omega = 0$, не обращая внимания на особенность в нуле. Имеем:

$$\begin{aligned} -\hat{H}_0 G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) &= \\ &= \begin{pmatrix} \frac{Ze^2}{r} & v_f(-i; -s)(-i\nabla) \\ v_f(i; -s)(-i\nabla) & \frac{Ze^2}{r} \end{pmatrix} G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (231)$$

Переходя к полярным координатам для дифференциальной части оператора, действующего на функцию Грина, получаем

$$\begin{aligned} -iv_f (\sigma_y \quad -s\sigma_x) \begin{pmatrix} \partial/(\partial x) \\ \partial/(\partial y) \end{pmatrix} = \\ = v_f \left[\begin{pmatrix} 0 & -ie^{-is\phi} \\ ie^{is\phi} & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -se^{-is\phi} \\ -se^{is\phi} & 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r}, \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix}^T. \end{aligned} \quad (232)$$

Тогда задача запишется иначе в виде

$$\begin{aligned} v_f \left[\begin{pmatrix} 0 & -se^{-is\phi} \\ -se^{is\phi} & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \phi} + \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-is\phi} \\ ie^{is\phi} & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \right] G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) + \\ + \frac{Ze^2}{r} G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \end{aligned} \quad (233)$$

Рассмотрим теперь вопрос о сохранении момента в задаче.

Оператор момента импульса можно записать в виде

$$\hat{L} = x\hat{p}_y - y\hat{p}_x = -i\frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (234)$$

Проводя некоторые вычисления, можно убедиться, что коммутатор

$$[\hat{L}, \hat{H}_0] = -\frac{s}{2} [\sigma_z, \hat{H}_0]. \quad (235)$$

Таким образом, если ввести оператор \hat{J} , аналогичный оператору полного момента в задаче Дирака, то он будет коммутировать с Гамильтонианом:

$$\hat{J} = \hat{L} + s\frac{\sigma_z}{2}. \quad (236)$$

Отсюда следует, что волновые функции задачи представимы в виде

$$|\psi_{n,j}(\mathbf{r})\rangle = \Theta_j^s(\phi) |\psi_{n,j}(\mathbf{r})\rangle \quad (237)$$

где

$$\Theta_j^s(\phi) = \begin{pmatrix} e^{i(j-s/2)\phi} & 0 \\ 0 & e^{-i(j-s/2)\phi} \end{pmatrix}, \quad (238)$$

а j - полуцелое собственное значение оператора полного момента для волновой функции. Функции Грина же, в таком случае, представимы в виде

$$G^s(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \omega) = \sum_j \Theta_j^s(\phi) G_j^s(r, r'; \omega) (\Theta_j^s(\phi'))^\dagger. \quad (239)$$

Уравнение на функции Грина, в таком случае, преобразуется к виду

$$\left\{ Ze^2 + iv_f \begin{pmatrix} 0 & js + 1/2 \\ js - 1/2 & 0 \end{pmatrix} + v_f \sigma_y r \frac{\partial}{\partial r} \right\} G_j^s(r, r'; \omega) = \delta(r - r'). \quad (240)$$

Рассмотрим вместо этого него уравнение на волновые функции, которое нас больше интересует в этом случае:

$$\left\{ Ze^2 + iv_f \begin{pmatrix} 0 & js + 1/2 \\ js - 1/2 & 0 \end{pmatrix} + v_f \sigma_y r \frac{\partial}{\partial r} \right\} |\Psi(r)\rangle = 0. \quad (241)$$

Решая это уравнение, получаем, что общее его решение записывается в форме

$$|\Psi(r)\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{r}{a}} \left(\left(\frac{r}{a} \right)^\alpha + \left(\frac{r}{a} \right)^{-\alpha} - \frac{1}{\alpha} \left(\frac{Ze^2}{v_f} \sigma_y + js \sigma_z \right) \left(\left(\frac{r}{a} \right)^\alpha - \left(\frac{r}{a} \right)^{-\alpha} \right) \right) |\chi\rangle, \quad (242)$$

где

$$\alpha = \sqrt{\frac{Z^2 e^4}{v_f^2} + j^2}. \quad (243)$$

Нас интересует, можно ли подобрать начальные условия таким образом, чтобы решение убывало на бесконечности. Иначе говоря, нам нужно узнать, существует ли $|\chi\rangle$, которое решает уравнение

$$\begin{pmatrix} \alpha - js & \frac{Ze^2}{v_f} i \\ -\frac{Ze^2}{v_f} i & \alpha + js \end{pmatrix} |\chi\rangle = 0, \quad (244)$$

и найти его.

Убеждаемся прямым вычислением, что детерминант этой матрицы всегда равен нулю. В таком случае, решение уравнения имеет вид

$$|\chi\rangle = \begin{pmatrix} -\frac{Ze^2}{v_f} i \\ \sqrt{\frac{Z^2 e^4}{v_f^2} + j^2} - js \end{pmatrix}. \quad (245)$$

Таким образом, континуальное уравнение действительно всегда имеет решение, спадающее на бесконечности степенным образом. Оно имеет степень $-\sqrt{\frac{Z^2 e^4}{v_f^2} + j^2} + \frac{1}{2}$.

4.3.2 О существовании степенных решений

Вообще говоря, при работе со степенными состояниями нельзя пользоваться приближением для слабо локализованных состояний, поскольку из-за сингулярности в нуле функция $G_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}^s$ будет затухать на больших волновых векторах слишком медленно. Если мы хотим найти точное выражение для них в нашей задаче, нужно использовать некое иное приближение. Для нахождения подобных решений нужно каким-либо способом сшить функции Грина в континуальном приближении и точные решеточные функции на малых масштабах. На данный момент это сделать не удалось.

5 Описание результатов

В данной работе были исследованы различные случаи связанных состояний в графене в поле кулоновской примеси. Так, сначала были получены полностью связанные и резонансные состояния для примеси с потенциалом, локализованном на четырех узлах. Также было выяснено, какие из них применимы в некотором приближении для точной задачи о кулоновском потенциале.

Также было изучено континуальное приближение для графена и показано, какие связанные состояния, полученные в нем, могут наблюдаться в точной задаче. Также было предсказано существование слабо локализованного степенного решения в центре зоны, но не удалось обнаружить каких-либо способов описать его в терминах функций Грина.

Список литературы

- [1] A. K. Geim, K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature Materials* 6, 183 - 191 (2007) doi:10.1038/nmat1849
- [2] N. M. R. Peres et. al. Electronic Properties of Two-Dimensional Carbon. arXiv:cond-mat/0506709v1 [cond-mat.str-el] 27 Jun 2005
- [3] Левитов Л. С, Шитов А. В. Функции Грина. Задачи и решения. - М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003.
- [4] Cristina Bena, Gilles Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. arXiv:0712.0765v1
- [5] Valery P. Gusynin et. al. AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics

- [6] A. H. Castro Neto et. al. The electronic properties of graphene. Reviews of modern physics, vol 81
- [7] Naomichi Hatano et. al. Some properties of the resonant state in quantum mechanics and its computation.
- [8] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: ФИЗМАТ ЛИТ, 2002. ISBN 5-9221-0057-2 (Т. III).
- [9] J. Mawhin and A. Ronveaux. Schrodinger and Dirac equations for the Hydrogen atom, and Laguerre polynomials.
- [10] Vitor M. Pereira et. al. The Coulomb impurity problem in graphene. arXiv:0706.2872v2