

О.О. СОБОЛЬ

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
(Просп. Академіка Глушкова, 2, Київ 03022; e-mail: sobololeks@ukr.net)**ВАРІАЦІЙНИЙ МЕТОД
ОБЧИСЛЕННЯ КРИТИЧНОЇ ВІДСТАНИ В ЗАДАЧІ
ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ У ГРАФЕНІ**

УДК 538.915

Досліджено надкритичну нестабільність в системі двох заряджених домішок у графені з квазічастинками, що в неперервній границі описуються двовимірним рівнянням Дірака. Розглянуто випадок, коли заряд кожної з двох однакових домішок є субкритичним, а їх сума перевищує критичний заряд в задачі про один кулонівський центр. Розвинуто варіаційний метод, за допомогою якого обчислюється значення критичної відстані між домішками R_{cr} як функції повного заряду системи. Встановлено, що R_{cr} зростає зі збільшенням повного заряду двох домішок та зі зменшенням ширини квазічастинкової щільності. Проведено порівняння результатів з даними попередніх досліджень.

Ключові слова: графен, надкритична нестабільність, критична відстань, варіаційний метод Канторовича.

1. Вступ

Хоча безщільний лінійний спектр графену було отримано ще досить давно [1] при побудові зонної моделі графіту за умови нехтування взаємодії між атомними площинами вуглецю, сам графен було вперше отримано в 2004 році [2], відколи й почалося його інтенсивне теоретичне та експериментальне вивчення. Він постійно привертає до себе увагу науковців всього світу, завдяки своїм унікальним властивостям. Зокрема, він є одним з перших двовимірних кристалів, має надвисоку механічну міцність та рухливість носіїв заряду, чим зумовлені перспективи його застосування в новітній наноелектроніці. Також розгляд фізики графену є цікавим і з точки зору фундаментальних наукових досліджень. Адже, як виявилось, вона має глибинний зв'язок з квантовою електродинамікою (КЕД) та іншими квантовими теоріями поля.

Графен має кристалічну ґратку у вигляді бджолиних сот. У наближенні сильного зв'язку спектр низькоенергетичних квазічастинкових збуджень є лінійним, і вони описуються безмасовим $(2 + 1)$ -вимірним рівнянням Дірака [3–6]. Таким чином, у неперервній границі маємо ефективну квантовопольову теорію з $(2 + 1)$ -вимірними діраківськими ферміонами, що взаємодіють зі звичайним три-

вимірним потенціалом Кулона $\sim 1/r$. Ці обставини свідчать про можливість твердотільної реалізації експериментів для спостереження таких явищ КЕД, як парадокс Клейна, ефект Швінгера (народження пар у сильному зовнішньому електричному полі), надкритичний атомний колапс та ін., які ще не спостерігалися в природі. І дійсно, в графені було виявлено клейнівське тунелювання [7] і, зовсім нещодавно, експериментально спостерігався надкритичний атомний колапс заряджених домішок [8].

Розв'язок релятивістської задачі Кеплера з урахуванням скінченних розмірів атомного ядра [9] показав, що при перевищенні так званого *критичного* заряду ядра $Z_{cr} \approx 170$ енергетичні рівні зв'язаних станів занурюються в нижній континуум і спостерігається виліт позитронів [10, 11]. Однак, ядер з таким зарядом не існує, тому ефект так і не був спостережений. Згодом, виникла ідея про лобові (або майже лобові) зіткнення ядер важких атомів, наприклад, урану [10, 12–14]. У цьому випадку їх сумарний заряд перевищує критичний і існує така відстань між ядрами, за якої відбувається занурення найнижчого зв'язаного стану в нижній континуум. Ця відстань також називається *критичною*. На жаль, в релятивістській задачі двох центрів змінні не розділяються в жодній системі координат, а тому побудувати аналітичний розв'язок не вдається [10, 11]. Проте, були прове-

© О.О. СОБОЛЬ, 2014

дені розрахунки за допомогою наближених методів квантової механіки, зокрема варіаційного [15], і було отримано залежності критичної відстані між ядрами від повного заряду системи.

У фізиці графену замість швидкості світла c фігурує швидкість Фермі: $v_F \approx 10^6$ м/с. Тоді “стала тонкої структури” для графену $\alpha = \frac{e^2}{\hbar v_F} \approx 2,19$. Але насправді, графен знаходиться на діелектричній підкладці, тому взаємодія з домішкою із зарядом Ze описується константою $\beta = Z\alpha/\kappa$, де κ – діелектрична проникність підкладки. Задача про надкритичну нестабільність однієї зарядженої домішки в безщілинному графені детально вивчалась в роботах [16, 17]. Для графену зі щілиною 2Δ у випадку регуляризованого кулонівського потенціалу $V(r) = -\frac{Ze^2}{\kappa r}\theta(r-R) - \frac{Ze^2}{\kappa R}\theta(R-r)$ було виявлено [18], що перехід до надкритичного режиму відбувається при $\beta_c = 1/2 + \pi^2/\log^2(c\Delta R/\hbar v_F)$, де $c \approx 0,21$.

І хоча в графені надкритична нестабільність проявляється вже при зарядах домішок $Z \gtrsim 1$, можливість її спостереження є ілюзорною, оскільки існують експериментальні труднощі в отриманні домішок із зарядом, вищим за 1. Виходом із ситуації, що складається, є розміщення кількох заряджених домішок на невеликій ділянці графену. Саме цей підхід і був реалізований групою вчених з Каліфорнійського університету [8] для спостереження надкритичної нестабільності в графені (в ролі домішок використовувались іонізовані димери кальцію). Отже, незважаючи на те, що константа взаємодії в графені є в 300 разів більшою, і тут виникає необхідність розгляду не однієї, а кількох домішок, розміщених поруч. Найпростішим випадком є задача про два кулонівських центри. В роботі [19] було обчислено критичну відстань між домішками, розраховано положення та ширину резонансу, що виникає в нижньому континуумі в надкритичному режимі за допомогою варіаційного методу в першому наближенні. Ця стаття присвячена реалізації наступного наближення у варіаційному методі.

Робота побудована таким чином. В розділі 2 розглянуто постановку задачі та обчислено асимптотики хвильової функції стану, що занурюється в нижній континуум. В розділі 3 описано варіаційний метод знаходження критичної відстані між домішками. Обговорення результатів та висновки наведені в розділі 4.

2. Постановка задачі

У наближенні сильного зв'язку зонний спектр графену має валентну зону та зону провідності, які дотикаються у двох нееквівалентних точках оберненої кристалічної ґратки. Це так звані *точки Дірака* \mathbf{K}_\pm . При цьому спектр низькоенергетичних збуджень є лінійним. Ефективний гамільтоніан, що описує електронні квазічастинкові збудження в околі точок Дірака, має вигляд $(2+1)$ -вимірному гамільтоніана Дірака. У випадку, коли між валентною зоною та зоною провідності існує квазічастинкова щілина, в гамільтоніані з'являється масовий доданок:

$$H = v_F \boldsymbol{\tau} \mathbf{p} + \xi \Delta \tau_z + V(r), \quad (1)$$

де \mathbf{p} – канонічний імпульс, τ_i – матриці Паулі, і Δ – півширина квазічастинкової щілини. Цей гамільтоніан діє в просторі двокomпонентних спінорів $\Psi_{\xi s}$, що несуть долинний ($\xi = \pm$) та спіновий ($s = \pm$) індекси. За стандартною домовленістю, $\Psi_{+s}^T = (\psi_A, \psi_B)_{K_+s}$, $\Psi_{-s}^T = (\psi_B, \psi_A)_{K_-s}$, де A, B – відповідні підґратки гексагональної ґратки графену. Потенціал взаємодії має вигляд

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\kappa} \left(\frac{Z_1}{r_1} + \frac{Z_2}{r_2} \right), \quad (2)$$

де κ – діелектрична проникність підкладки, $Z_{1,2}$ – заряди домішок, $r_{1,2} = |\mathbf{r} \pm \mathbf{R}/2|$ – відстані від кулонівських домішок до електрона (див. рис. 1).

Оскільки потенціал від спіну не залежить, надалі спіновий індекс опускатимемо. Також вважатимемо, що електрон знаходиться поблизу точки Дірака \mathbf{K}_+ . Якщо він знаходиться поблизу точки \mathbf{K}_- , то необхідно замінити скрізь Δ на $-\Delta$. В нещодавніх експериментах [8] розглядалися однакові домішки, тому тут також ми поклали $Z_1 = Z_2 = Z$.

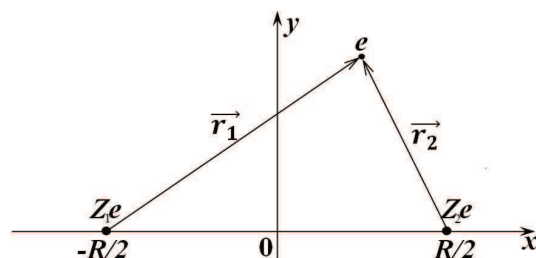


Рис. 1. Електрон у полі двох кулонівських домішок

Таким чином, рівняння Дірака для електрона у потенціалі двох заряджених домішок має вигляд

$$(v_F \tau_x p_x + v_F \tau_y p_y + \Delta \tau_z + V(\mathbf{r})) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}). \quad (3)$$

Для двокомпонентного спінора $\Psi(\mathbf{r}) = (\phi, \chi)^T$ воно переписеться так:

$$\begin{cases} (E - V - \Delta) \phi + i v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) \chi = 0, \\ (E - V + \Delta) \chi + i v_F \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) \phi = 0. \end{cases} \quad (4)$$

Якщо виразити компоненту χ з другого рівняння системи (4), то отримаємо диференціальне рівняння другого порядку на другу компоненту ϕ :

$$\begin{aligned} (\partial_x^2 + \partial_y^2) \phi + \frac{\frac{\partial V}{\partial x} - i \frac{\partial V}{\partial y}}{E - V + \Delta} \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + \\ + v_F^{-2} ((E - V)^2 - \Delta^2) \phi = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Надкритична нестабільність настає, коли найнижчий зв'язаний стан занурюється в нижній континуум, тобто $E = -\Delta$ [10, 11]. В подальших розрахунках розглядатимемо лише таке значення енергії.

2.1. Асимптотична поведінка хвильової функції

Дослідимо асимптотичну поведінку хвильової функції при великих відстанях $r \rightarrow \infty$. В цьому наближенні потенціал має вигляд

$$V(\mathbf{r}) = -\zeta v_F \left(\frac{1}{r} + \frac{R^2}{4r^3} P_2(\cos \varphi) + O\left(\frac{1}{r^5}\right) \right), \quad (6)$$

де $\zeta = 2Z\alpha/\kappa$, а $P_2(x)$ – поліном Лежандра другого степеня. Підставляючи його до рівняння (5) і залишаючи лише найбільш вагомні доданки, отримуємо

$$\phi'' + \frac{2}{r} \phi' + \left(\frac{\zeta^2}{r^2} - \frac{2m\zeta}{r} \right) \phi = 0, \quad (7)$$

де $m = \Delta/v_F$ – обернена комптонівська довжина хвилі квазічастинки. Загасаючий на нескінченності розв'язок цього рівняння описується функцією Макдональда:

$$\phi(r) = C r^{-1/2} K_{i\gamma}(\sqrt{8m\zeta r}), \quad \gamma = \sqrt{4\zeta^2 - 1}. \quad (8)$$

Тоді, враховуючи асимптотичну поведінку функції Макдональда [20], матимемо

$$\phi_{\text{asym}}(r) = \tilde{C} r^{-3/4} \exp(-\sqrt{8m\zeta r}), \quad r \rightarrow \infty. \quad (9)$$

Щоб дослідити асимптотичну поведінку функції безпосередньо біля однієї з домішок, зручно перейти до еліптичної системи координат (ξ, η) :

$$\xi \equiv \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta \equiv \frac{r_1 - r_2}{R}. \quad (10)$$

Нові координати змінюються в діапазонах:

$$1 \leq \xi < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1,$$

де в точках $\xi = 1, \eta = \pm 1$ розміщуються домішки.

В еліптичних координатах потенціал взаємодії має вигляд

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{2\zeta v_F \xi}{R(\xi^2 - \eta^2)}. \quad (11)$$

Наближення до однієї з домішок означає малість величини $\xi^2 - \eta^2$. Перепишемо рівняння (5) в еліптичних координатах:

$$\begin{aligned} \frac{4}{R^2(\xi^2 - \eta^2)} \left[\sqrt{\xi^2 - 1} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\sqrt{\xi^2 - 1} \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \right. \\ \left. + \sqrt{1 - \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\sqrt{1 - \eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \right] \phi + \\ + \frac{4}{R^2 \xi (\xi^2 - \eta^2)^3} \left[\xi^4 \eta + 3\xi^2 \eta^3 - 3\xi^2 \eta - \eta^3 - \right. \\ \left. - i \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} (\xi^3 + 3\xi \eta^2) \right] \times \\ \times \left[\left(\eta(\xi^2 - 1) + i \xi \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + \right. \\ \left. + \left(\xi(1 - \eta^2) - i \eta \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right) \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + \\ + \left(\frac{4\zeta^2 \xi^2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)^2} - \frac{4\zeta m \xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} \right) \phi = 0. \end{aligned} \quad (12)$$

Шукатимемо розв'язок у вигляді: $\phi(\xi, \eta) = \phi(\mu)$, де $\mu = \xi^2 - \eta^2 = 4r_1 r_2 / R^2$. Після підстановки до рівняння (12) залишимо лише найбільш вагомні доданки і отримаємо рівняння

$$\frac{d^2 \phi}{d\mu^2} + \frac{2}{\mu} \frac{d\phi}{d\mu} + \frac{\zeta^2}{4\mu^2} \phi = 0, \quad (13)$$

регулярним при $\mu \rightarrow 0$ розв'язком якого є

$$\phi_{\text{imp}}(\mu) = C_2 \mu^{-\sigma/2}, \quad \sigma = 1 - \sqrt{1 - \zeta^2}. \quad (14)$$

Беручи до уваги те, що змінна $\mu \simeq 4r^2/R^2$ при $r \rightarrow \infty$, перепишемо розв'язок (8) у вигляді

$$\phi(\mu) = C_1 \mu^{-1/4} K_{i\gamma}(2\sqrt{m\zeta R} \mu^{1/4}). \quad (15)$$

Зшиваючи розв'язки (14) і (15) в точці $\mu = 1$, можна отримати оцінку для критичної відстані $R_{\text{cr}}(\zeta)$ як функції ζ . Ця залежність задовольняє трансцендентне рівняння:

$$2\sqrt{1 - \zeta^2} - 1 = 2\sqrt{m\zeta R} \frac{K'_{i\gamma}(2\sqrt{m\zeta R})}{K_{i\gamma}(2\sqrt{m\zeta R})}. \quad (16)$$

Його чисельний розв'язок зображено штрихпунктирною лінією на рис. 2. В наступному розділі цю залежність буде уточнено за допомогою варіаційного методу.

3. Варіаційний метод

Як було зазначено вище, релятивістське рівняння Дірака для задачі двох кулонівських центрів не допускає розділення змінних в жодній ортогональній системі координат, а тому неможливо отримати його розв'язок в аналітичній формі. Для побудови наближеного розв'язку скористаємось, як і у випадку КЕД [15], варіаційним методом. Як зазначено в роботі [21], найкращої точності варіаційний метод досягає тоді, коли його пробні функції задовольняють асимптотики точного розв'язку поблизу заряджених домішок та на нескінченності. Зазначені асимптотики було знайдено в попередньому розділі.

Щоб поставити варіаційну задачу, достатньо помітити, що диференціальне рівняння (5) може бути отримане під час дослідження на екстремум такого функціонала:

$$S[\phi] = \int \left((E - V + \Delta)^{-1} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^2 - v_{\text{F}}^{-2} (E - V - \Delta) |\phi|^2 \right) dx dy, \quad (17)$$

за умови збереження норми:

$$N = \int \Psi^* \Psi dx dy = \int \left[v_{\text{F}}^{-2} |\phi|^2 + \right.$$

$$\left. + (E - V + \Delta)^{-2} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^2 \right] dx dy. \quad (18)$$

Означимо нове поле $\psi = W^{-1/2} \phi$, $W = E - V + \Delta$. Тоді функціонал $S[\phi]$ може бути представлений у формі, характерній для нерелятивістської квантової механіки:

$$S[\psi] = \int \left[|\nabla \psi|^2 + i \left(\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi^* \right) \psi - i \psi^* \left(\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi \right) + 2(U - \epsilon) |\psi|^2 \right] dx dy, \quad (19)$$

де $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \epsilon_{ij} a_i b_j$, $\epsilon = (E^2 - \Delta^2)/2v_{\text{F}}^2$ – ефективна енергія, а ефективний потенціал U має вигляд

$$U = \frac{EV}{v_{\text{F}}^2} - \frac{V^2}{2v_{\text{F}}^2} + \frac{\Delta V}{4W} + \frac{3}{8} \frac{(\nabla V)^2}{W^2}. \quad (20)$$

Другий і третій доданки у функціоналі (19) описують псевдоспін-орбітальну взаємодію. Норма набуває вигляду

$$N = \int \left[|\nabla \psi|^2 + i \left(\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi^* \right) \psi - i \psi^* \left(\frac{\nabla V}{2W} \times \nabla \psi \right) + \left(\frac{W^2}{v_{\text{F}}^2} + \frac{\Delta V}{2W} + \frac{5(\nabla V)^2}{4W^2} \right) |\psi|^2 \right] W^{-1} dx dy \quad (21)$$

і є важливою при виборі правильних граничних умов. Оскільки надалі будемо цікавитись випадком, коли найнижчий зв'язаний стан занурюється в нижній континуум, то покладемо $E = -\Delta$ ($\epsilon = 0$), $W = -V$. Тоді функціонал $S[\psi]$ спроститься.

В розділі 2 було встановлено, що точний розв'язок задачі в обох асимптотичних випадках (14) і (15) залежить лише від однієї змінної μ . А тому застосуємо варіаційний метод Канторовича (докладніше в розділі 3 огляду [22]), де в ролі пробних функцій виберемо:

$$\psi = \sum_{k=1}^N \psi_k(\mu) \nu^{k-1}. \quad (22)$$

Тут $\psi_k(\mu)$ – набір невідомих функцій, $\nu = \nu(\xi, \eta)$ – фіксована функція координат, яка є незалежною

до μ . В роботі [15] розглядалися два варіанти вибору функції ν . Отримані результати були досить близькими, тому в цій роботі зупинимось на одному з варіантів, а саме: $\nu = \eta^2 / (\xi^2 - \eta^2) = (r_1 - r_2)^2 / 4r_1r_2$.

Зробивши підстановку (22) до функціонала (19) та проінтегрувавши по ν , матимемо

$$S_N(\psi) = 4 \sum_{k,l=1}^N \int_0^\infty d\mu \left(P_{kl} \psi'_k \psi_l^{*'} + Q_{kl} \psi_k \psi_l^* + R_{kl} \psi'_k \psi_l^* + R_{kl}^\dagger \psi_k \psi_l^{*'} \right), \quad (23)$$

де \hat{P} , \hat{Q} та \hat{R} – матриці $N \times N$, що залежать від μ . Вирази для них ((A12)–(A14)) наведені в Додатку А.

Функціонал (23) досягає свого мінімуму на розв'язках рівнянь Лагранжа–Ейлера ($l = \overline{1, N}$):

$$\frac{d}{d\mu} \left(P_{kl} \frac{d\psi_k}{d\mu} + R_{kl}^\dagger \psi_k \right) - Q_{kl} \psi_k - R_{kl} \frac{d\psi_k}{d\mu} = 0. \quad (24)$$

Граничні умови вибираються так, щоб норма залишалася скінченною, а також з того, що пробні функції мають задовольняти асимптотики точного розв'язку. Набір рівнянь Лагранжа–Ейлера та граничних умов до них формують разом крайову задачу, яку необхідно розв'язати.

У роботі [19] було застосовано перше наближення варіаційного методу Канторовича з $N = 1$. За допомогою шутінг-методу було обчислено залежність критичної відстані між домішками від сумарного заряду домішок $R_{cr}(\zeta)$. Отримана залежність наведена для порівняння на рис. 2 (штрихова лінія).

Більшої точності можна досягти, застосовуючи варіаційний метод Канторовича із $N > 1$. Однак, тут існують деякі відмінності від розглянутого в [19] випадку $N = 1$. Насамперед, уже не можна застосовувати шутінг-метод, оскільки маємо справу не з одним, а з системою диференціальних рівнянь. В роботі [23] зазначено, що для полегшення чисельних розрахунків необхідно звести систему диференціальних рівнянь другого порядку до матричного диференціального рівняння першого порядку за допомогою такої підстановки:

$$\psi'_i(\mu) = \sum_{j=1}^N Y_{ij}(\mu) \psi_j(\mu). \quad (25)$$

Тоді отримуємо нелінійне матричне рівняння Ріккати на матрицю \hat{Y} :

$$\hat{Y}' = \hat{A} - \hat{B}\hat{Y} - \hat{Y}^2, \quad (26)$$

де матриці-коефіцієнти мають вигляд

$$\hat{A} = \hat{P}^{-1}(\hat{Q} - \hat{R}'), \quad (27)$$

$$\hat{B} = \hat{P}^{-1}(\hat{R} - \hat{R}^T + \hat{P}'). \quad (28)$$

Матриці \hat{P} , \hat{Q} , \hat{R} є сингулярними в нулі та нескінченності. Це відображає той факт, що різні функції $\psi_k(\mu)$ (як і різні елементи матриці \hat{Y}) мають різні степені зростання/спадання в особливих точках. Для подолання цієї незручності здійснимо лінійне перетворення пробних функцій:

$$\psi_k(\mu) = S_{kl}(\mu) \tilde{\psi}_l(\mu), \quad \det \hat{S}(\mu) \neq 0. \quad (29)$$

Означимо нову матрицю \hat{Y}_S :

$$\tilde{\psi}'_k(\mu) = (Y_S)_{kl}(\mu) \tilde{\psi}_l(\mu). \quad (30)$$

Вона пов'язана з матрицею \hat{Y} таким співвідношенням:

$$\hat{Y}_S = \hat{S}^{-1} \hat{Y} \hat{S} - \hat{S}^{-1} \hat{S}'. \quad (31)$$

Матриця \hat{Y}_S також задовольняє рівняння Ріккати:

$$\hat{Y}'_S = \hat{A}_S - \hat{B}_S \hat{Y}_S - \hat{Y}_S^2. \quad (32)$$

Закони зміни коефіцієнтів рівнянь (32) та (24) при перетворенні (29) наведені в Додатку В. З них випливає критерій вибору матриці \hat{S} : після перетворення матриця \hat{P}_S має бути невиродженою (оскільки повинна існувати її обернена).

В околі кожної з особливих точок $\mu = 0$ і $\mu \rightarrow \infty$ необхідно вибрати свою матрицю перетворення $\hat{S}^{0/\infty}$, перетворені матриці-коефіцієнти \hat{A}_S, \hat{B}_S необхідно розкласти за степенями змінної μ . Відповідно, і невідому матрицю \hat{Y}_S треба шукати у вигляді:

$$\begin{aligned} \hat{Y}_S^{(0)} &= \mu^{\lambda_0} \left(\hat{Y}_1^{(0)} + \mu \hat{Y}_2^{(0)} + \mu^2 \hat{Y}_3^{(0)} + \dots \right), \quad \mu \rightarrow 0, \\ \hat{Y}_S^{(\infty)} &= \mu^{\lambda_\infty} \left(\hat{Y}_1^{(\infty)} + \frac{1}{\mu} \hat{Y}_2^{(\infty)} + \frac{1}{\mu^2} \hat{Y}_3^{(\infty)} + \dots \right), \quad (33) \\ &\mu \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

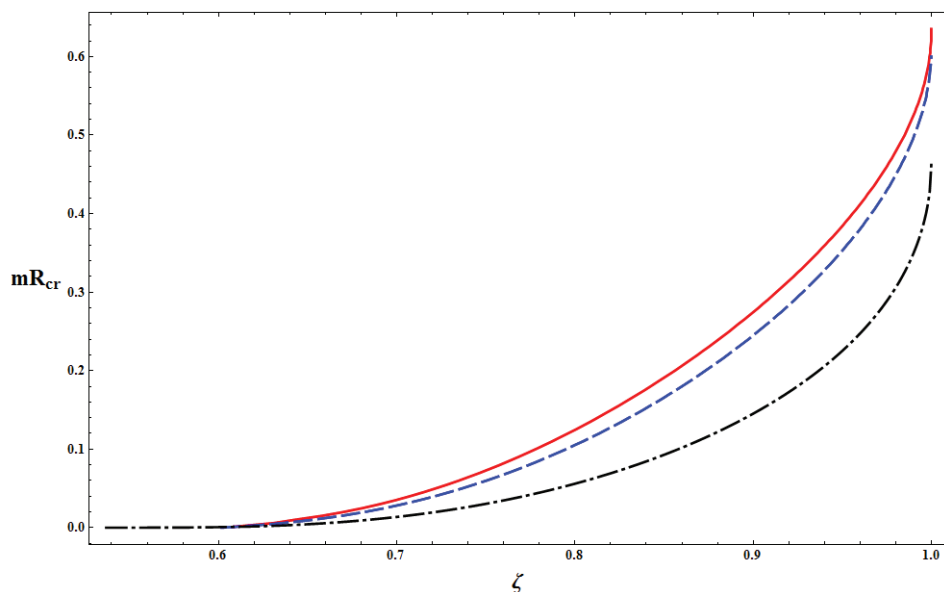


Рис. 2. Залежність $mR_{cr}(\zeta)$, отримана з чисельного розв'язку рівнянь (16) (штрихпунктирна лінія) та (35) (суцільна лінія), для порівняння наведено результати розрахунків у першому наближенні варіаційного методу з роботи [19] (штрихова лінія)

У результаті такої підстановки до рівняння (32) і прирівнювання числових коефіцієнтів при однакових степенях змінної μ отримаємо ланцюжок пов'язаних лінійних алгебраїчних рівнянь на матриці $\hat{Y}_2, \hat{Y}_3, \dots$, але на матрицю \hat{Y}_1 матимемо квадратне рівняння вигляду:

$$\hat{Y}_1^2 - \hat{B}_1 \hat{Y}_1 - \hat{A}_1 = 0, \quad (34)$$

де \hat{A}_1, \hat{B}_1 – деякі числові матриці. У випадку $N = 2$ вдається добрати такі матриці перетворення $\hat{S}^{0/\infty}$, щоб $\hat{B}_1 = B_1 \hat{1}$. Тоді квадратне матричне рівняння вдається розв'язати. З двох коренів необхідно вибрати той, який відповідає більш регулярній поведінці пробних функцій в околі особливих точок (додатний в околі $\mu = 0$ і від'ємний в околі $\mu \rightarrow \infty$). Показники степеня $\lambda_{0/\infty}$ вибирають таким чином, щоб забезпечити збігання степенів найбільш вагомих доданків в обох частинах рівняння.

Таким чином, знаходять початкові умови на матрицю \hat{Y}_S в нулі та на нескінченності. Відповідні матриці наведені в Додатку В. Після цього відбувається чисельне інтегрування рівнянь Ріккати методом Рунге-Кутти з урахуванням початкових умов в областях $\mu \in [0, 1]$, $\mu \in [1, \infty)$. Обчислюються значення матриць $\hat{Y}_S^{0/\infty}(\mu = 1)$. Потім не-

обхідно здійснити обернені перетворення і знайти матриці $\hat{Y}^{0/\infty}(\mu = 1)$. Умовою гладкого зшивання пробних функцій в областях $\mu > 1$ та $\mu < 1$ є:

$$\delta(mR_{cr}, \zeta) \equiv \det[\hat{Y}^0(\mu = 1) - \hat{Y}^\infty(\mu = 1)] = 0. \quad (35)$$

У цій роботі розглядається випадок $N = 2$. Відповідні матриці перетворень та матриці початкових умов наведені в Додатку В. Всі перераховані вище маніпуляції здійснювались для різних значень добутку mR при фіксованому значенні ζ . Таке значення mR_{cr} , за якого виконано умову (35), вважається критичним. За результатами чисельних розрахунків побудовано криву залежності $mR_{cr}(\zeta)$ (суцільна лінія на рис. 2).

4. Висновки

Було проведено дослідження надкритичної нестабільності в системі двох ідентичних заряджених домішок в графені. Заряд кожної з домішок є субкритичним, але їх сума $\zeta = 2Z\alpha/\kappa$ перевищує критичне значення $\zeta_c = 1/2$. Таким чином, для кожного фіксованого ζ існує така відстань між ними R_{cr} , за якої настає надкритичний режим. Актуальність проведеного дослідження зумовлена нещодавніми спостереженнями надкритичної неста-

більшості в кластерах домішок Ca, поміщених на графені [8].

Особливістю даної задачі є те, що змінні в рівнянні Дірака не розділяються в жодній відомій системі координат. А отже, отримати розв'язок в аналітичному вигляді неможливо. Тому для знаходження залежності критичної відстані від заряду системи було застосовано варіаційний метод Канторовича. Для безмасових частинок критичні явища пов'язані лише з появою резонансу в нижньому континуумі. Оскільки у варіаційному методі незручно працювати з резонансами, ми припустили наявність в зонному спектрі графену щілини Δ , яку можна експериментально створити одним із багатьох методів (наприклад, переходом до графенової нанострічки, створенням деформацій, гідрогенізацією поверхні тощо [24]). Наявність цієї щілини призвела до появи рівнів дискретного спектра, тому спостерігалось занурення найнижчого рівня в нижній континуум. Відстань між домішками, коли це відбувається, означена як критична.

Варіаційний метод Канторовича передбачає використання довільної кількості пробних функцій. У цій роботі застосовувався метод з двома пробними функціями. Для порівняння наводяться результати аналогічних розрахунків за допомогою методу з однією пробною функцією, що проводились в роботі [19]. Отримані залежності mR_{cr} від ζ побудовані на рис. 2 разом із наближеною кривою, отриманою зі зшивання асимптотик точного розв'язку. Як бачимо, результати двох послідовних наближень варіаційного методу досить добре узгоджуються між собою як якісно, так і кількісно. Максимальна розбіжність між ними не перевищує 8–10%. Цей факт свідчить про те, що результати, наведені в статті [19], є задовільними, незважаючи на простоту наближення. Як і має бути, $R_{cr} \rightarrow 0$ при $\zeta \rightarrow 1/2$ і $R_{cr} \rightarrow \infty$ при $\zeta \rightarrow 1$ (в першому випадку надкритична нестабільність настає лише при суміщенні домішок, в другому – кожна з домішок стає надкритичною). Також показано, що при $\Delta \rightarrow 0$ $R_{cr} \rightarrow \infty$ для будь-якого фіксованого значення ζ . Це означає, що, коли сумарний заряд системи перевищує критичний, система знаходиться в надкритичному стані за будь-якої скінченної відстані між домішками.

Як показано в [19], ця надкритична нестабільність проявляється появою в нижньому континуумі квазістаціонарного стану. Він може бути спо-

стережений в локальній густині станів (LDOS), яка є експериментально вимірюваною величиною. Але енергія та ширина резонансу спадають при віддаленні домішок одна від одної як $\frac{1}{R}$, а тому при досягненні деякої досить великої відстані резонанс стане непомітним (наприклад, через обмежену точність вимірювань). І тоді стан системи не можна буде відрізнити від субкритичного.

Висловлюю слова найщирішої вдячності Е.В. Горбару та В.П. Гусиніну за цінні поради і поправки, внесені під час обговорення матеріалів даної роботи. Робота підтримана грантом Державного фонду фундаментальних досліджень № F53.2/028.

ДОДАТОК А Вирази для матриць-коефіцієнтів

В цьому Додатку наведено вирази для матриць \hat{P} , \hat{Q} та \hat{R} у функціоналі (23). Функціонал (19) при $E = -\Delta$ набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
 S[\psi] = & 4 \sum_{k,l=1}^N \int_0^\infty d\mu d\nu |J| \left[(\nabla\mu)^2 \psi'_k \psi'_l{}^* \nu^{k+l-2} + \right. \\
 & + 2\nabla\mu \nabla\nu \operatorname{Re}(\psi_l^* \psi'_k) (l-1) \nu^{k+l-3} - \\
 & - 2 \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla\mu \right) \Im(\psi_l^* \psi'_k) \nu^{k+l-2} + \\
 & + \psi_l^* \psi_k \left[(\nabla\nu)^2 (l-1)(k-1) \nu^{k+l-4} - \right. \\
 & - i(l-k) \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla\nu \right) \nu^{k+l-3} + \\
 & \left. \left. + 2U \nu^{k+l-2} \right] \right] f(\mu, \nu), \tag{A1}
 \end{aligned}$$

де функції $\nabla\mu$, $\nabla\nu$, V , U можуть бути виражені в змінних μ, ν . Оскільки $\mu\nu = \eta^2 < 1$, $\mu(\nu+1) = \xi^2 > 1$, інтегрування в площині (μ, ν) здійснюється по криволінійному трикутнику:

$$\left(\frac{1}{\mu} - 1 \right) \theta(1-\mu) < \nu < \frac{1}{\mu}, \tag{A2}$$

що можна забезпечити функцією $f(\mu, \nu)$,

$$\begin{aligned}
 f(\mu, \nu) = & \theta(1-\mu\nu) \times \\
 & \times [\theta(1-\mu)\theta(\mu(\nu+1)-1) + \theta(\mu-1)]. \tag{A3}
 \end{aligned}$$

Перепишемо в змінних (μ, ν) всі величини, що фігурують у функціоналі (A1):

$$|J| = \frac{\mu R^2}{16} \frac{1}{\sqrt{\nu(\nu+1)(\mu+\mu\nu-1)(1-\mu\nu)}}, \tag{A4}$$

$$V(\mu, \nu) = -\frac{2\nu_F \zeta}{R} \sqrt{\frac{\nu+1}{\mu}}, \quad (\text{A5})$$

$$(\nabla \mu)^2 = \frac{16}{R^2} (\mu + 2\mu\nu - 1), \quad (\text{A6})$$

$$(\nabla \nu)^2 = \frac{16\nu(\nu+1)}{\mu^2 R^2}, \quad (\text{A7})$$

$$\nabla \mu \nabla \nu = -\frac{16\nu(\nu+1)}{R^2}, \quad (\text{A8})$$

$$\frac{\nabla V}{V} \times \nabla \mu = (\nabla \nu \times \nabla \mu) \frac{\partial \ln V}{\partial \nu} = \frac{8}{R^2 \mu} \frac{\sqrt{\nu(\mu + \mu\nu - 1)(1 - \mu\nu)}}{\sqrt{\nu+1}}, \quad (\text{A9})$$

$$\frac{\nabla V}{V} \times \nabla \nu = (\nabla \mu \times \nabla \nu) \frac{\partial \ln V}{\partial \mu} = \frac{8}{R^2 \mu^2} \sqrt{\nu(\nu+1)(\mu + \mu\nu - 1)(1 - \mu\nu)}, \quad (\text{A10})$$

$$2U = \frac{2}{R^2} \left[2\nu_F \zeta m R \sqrt{\frac{\nu+1}{\mu}} - 2\zeta^2 \frac{\nu+1}{\mu} - \frac{4\nu+1}{\mu} + \frac{3}{2} \frac{4\mu\nu^2 + 5\mu\nu + \mu - 1}{\mu^2(\nu+1)} \right]. \quad (\text{A11})$$

Функціонал (A1) набуває форми (23), де $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{Q}}$ та $\hat{\mathbf{R}}$ – матриці $N \times N$, що залежать від μ :

$$P_{kl}(\mu) = \int_0^\infty (\nabla \mu)^2 \nu^{k+l-2} |J| f(\mu, \nu) d\nu, \quad (\text{A12})$$

$$Q_{kl}(\mu) = \int_0^\infty \left[(\nabla \nu)^2 (l-1)(k-1) \nu^{k+l-4} - i(l-k) \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \nu \right) \nu^{k+l-3} + 2U \nu^{k+l-2} \right] |J| f(\mu, \nu) d\nu, \quad (\text{A13})$$

$$R_{kl}(\mu) = \int_0^\infty \left[\nabla \mu \nabla \nu (l-1) \nu^{k+l-3} + i \left(\frac{\nabla V}{2V} \times \nabla \mu \right) \nu^{k+l-2} \right] |J| f(\mu, \nu) d\nu. \quad (\text{A14})$$

У випадку $N = 2$ наведемо вирази для елементів матриць $\hat{\mathbf{P}}$, $\hat{\mathbf{Q}}$ та $\hat{\mathbf{R}}$. Ці вирази можуть бути отримані за допомогою інтегралів, наведених в [25], які виражаються через повні еліптичні інтеграли першого $K(k)$, другого $E(k)$ та третього роду $\Pi(k, l)$. До остаточного вигляду їх можна привести за допомогою тотожностей [26]:

$$\Pi(\mu, \mu) = \frac{\pi}{4(1-\mu)} + \frac{1}{2} K(\mu), \quad (\text{A15})$$

$$\Pi(\mu^2, \mu) = \frac{1}{1-\mu^2} E(\mu). \quad (\text{A16})$$

Також в силу того, що розглядається основний стан системи, а хвильова функція основного стану є дійсною, всі уявні частини коефіцієнтів не дають внеску. Таким чином, маємо

$$P_{11}(\mu) = \pi\mu, \quad (\text{A17})$$

$$P_{12}(\mu) = P_{21}(\mu) = \frac{\pi}{2}(1-\mu) + \theta(1-\mu) [2E(\mu) - (1-\mu^2)K(\mu)] + \theta(\mu-1)\mu \left[2E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1 - \frac{1}{\mu^2}\right) K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A18})$$

$$P_{22}(\mu) = \frac{\pi}{2} \frac{1-\mu+\mu^2}{\mu} + \theta(1-\mu) \frac{1-\mu}{\mu} [2E(\mu) - (1-\mu^2)K(\mu)] + \theta(\mu-1)(1-\mu) \left[2E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1 - \frac{1}{\mu^2}\right) K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A19})$$

$$R_{11}(\mu) = R_{21}(\mu) = 0, \quad (\text{20})$$

$$R_{12}(\mu) = -\frac{\pi}{2\mu} - \theta(1-\mu) \frac{E(\mu)}{\mu} - \theta(\mu-1) \left[E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \left(1 - \frac{1}{\mu^2}\right) K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A21})$$

$$R_{22}(\mu) = -\frac{\pi(2-\mu)}{4\mu^2} - \theta(1-\mu) \left[\frac{3-\mu}{2\mu^2} E(\mu) - \frac{1-\mu^2}{2\mu^2} K(\mu) \right] - \theta(\mu-1) \left[\frac{3-\mu}{2\mu} E\left(\frac{1}{\mu}\right) + \frac{(\mu-1)(\mu^2-\mu-2)}{2\mu^3} K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A22})$$

$$Q_{11}(\mu) = -\frac{\pi(\zeta^2-1)}{8\mu} + \frac{\zeta m R}{2} \left[\theta(1-\mu) K(\sqrt{\mu}) + \frac{\theta(\mu-1)}{\sqrt{\mu}} K\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right) \right] + \theta(1-\mu) \left[\frac{3}{8\mu(1+\mu)} E(\mu) - \frac{(2\zeta^2+1)(1+\mu)}{8\mu} K(\mu) \right] + \theta(\mu-1) \left[\frac{3}{8(1+\mu)} E\left(\frac{1}{\mu}\right) - \frac{(\zeta^2-1)(1+\mu)+3\mu}{4\mu^2} K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A23})$$

$$Q_{12}(\mu) = Q_{21}(\mu) = -\frac{\pi(3\mu+4(\zeta^2-1))}{32\mu^2} + \theta(1-\mu) \frac{\zeta m R}{2\mu} E(\sqrt{\mu}) + \theta(\mu-1) \frac{\zeta m R}{2\sqrt{\mu}} \left[E\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right) - \frac{\mu-1}{\mu} K\left(\frac{1}{\sqrt{\mu}}\right) \right] - \theta(1-\mu) \left[\frac{3\mu+2(\mu+1)(\zeta^2-1)}{8\mu^2(1+\mu)} E(\mu) + \frac{3(1-\mu)}{16\mu} K(\mu) \right] - \theta(\mu-1) \left[\frac{3\mu+2(\mu+1)(\zeta^2-1)}{8\mu(1+\mu)} E\left(\frac{1}{\mu}\right) + \frac{(1-\mu)(9\mu+4(1+\mu)(\zeta^2-1))}{16\mu^3} K\left(\frac{1}{\mu}\right) \right], \quad (\text{A24})$$

$$\begin{aligned}
 Q_{22}(\mu) = & \frac{\pi}{32\mu^3} (16 - (2\zeta^2 - 2 + 3\mu)(2 - \mu)) + \\
 & + \theta(1 - \mu) \frac{\zeta m R}{6\mu} \left[2 \left(\frac{2}{\mu} - 1 \right) E(\sqrt{\mu}) - \right. \\
 & - \left. \left(\frac{1}{\mu} - 1 \right) K(\sqrt{\mu}) \right] + \\
 & + \theta(\mu - 1) \frac{\zeta m R}{6\sqrt{\mu}} \left[2 \left(\frac{2}{\mu} - 1 \right) E \left(\frac{1}{\sqrt{\mu}} \right) - \right. \\
 & - \left. \left(1 - \frac{1}{\mu} \right) \left(\frac{3}{\mu} - 2 \right) K \left(\frac{1}{\sqrt{\mu}} \right) \right] + \\
 & + \theta(1 - \mu) \left[\frac{(1 - \mu) (2(\zeta^2 - 1)(\mu + 1) - 3\mu(1 - \mu))}{16\mu^3} K(\mu) + \right. \\
 & + \left. \frac{3\mu^2 + 13\mu + 16 + 2(\zeta^2 - 1)(\mu^2 - 2\mu - 3)}{16\mu^3(1 + \mu)} E(\mu) \right] + \\
 & + \theta(\mu - 1) \left[\frac{(1 - \mu)(3\mu^2 + 5\mu + 8)}{8\mu^4} K \left(\frac{1}{\mu} \right) + \right. \\
 & + \left. \frac{(\zeta^2 - 1)(1 - \mu)(\mu^2 - \mu - 2)}{8\mu^4} K \left(\frac{1}{\mu} \right) + \right. \\
 & + \left. \frac{3\mu^2 + 13\mu + 16 + 2(\zeta^2 - 1)(\mu^2 - 2\mu - 3)}{16\mu^2(1 + \mu)} E \left(\frac{1}{\mu} \right) \right]. \quad (A25)
 \end{aligned}$$

ДОДАТОК В

Особливості застосування варіаційного методу з $N = 2$

В цьому додатку наводяться деякі деталі застосування методу Канторовича у випадку $N = 2$.

В результаті перетворення (29) коефіцієнтів рівнянь (32) та (24) перетворюються так:

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{B}} \hat{\mathbf{S}}' - \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{S}}'', \quad (B1)$$

$$\hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{B}} \hat{\mathbf{S}} + 2\hat{\mathbf{S}}^{-1} \hat{\mathbf{S}}'', \quad (B2)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}}, \quad (B3)$$

$$\hat{\mathbf{R}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}}', \quad (B4)$$

$$\hat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{Q}} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{S}}'^T \hat{\mathbf{R}} \hat{\mathbf{S}}' + \hat{\mathbf{S}}^T \hat{\mathbf{R}}^T \hat{\mathbf{S}}' + \hat{\mathbf{S}}'^T \hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{S}}'. \quad (B5)$$

1. Інтервал $0 < \mu \leq 1$

$$\det \hat{\mathbf{P}}(\mu) = \frac{\pi^2 \mu^2}{8} + O(\mu^4), \quad \mu \rightarrow 0. \quad (B6)$$

Тому матрицю $\hat{\mathbf{S}}^{(0)}$ необхідно вибрати такою, щоб $\det \hat{\mathbf{S}}^{(0)} \sim \frac{1}{\mu}$. В цій роботі було вибрано матрицю:

$$\hat{\mathbf{S}}^{(0)}(\mu) = \begin{pmatrix} \frac{\mu-1}{\mu^{3/2}} & \frac{\mu+1}{\mu^{3/2}} \\ \frac{1}{\sqrt{\mu}} & -\frac{1}{\sqrt{\mu}} \end{pmatrix}, \quad \det \hat{\mathbf{S}}^{(0)} = -\frac{2}{\mu}. \quad (B7)$$

Показник степеня $\lambda_0 = -1$, що відповідає степеневій поведінці пробних функцій в околі точки $\mu = 0$. Коефіцієнти рівняння (34) мають вигляд

$$\hat{\mathbf{A}}_1^{(0)} = \begin{pmatrix} \frac{3-\zeta^2}{4} & -\frac{3}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{1-\zeta^2}{4} \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{B}}_1^{(0)} \equiv \hat{\mathbf{1}}. \quad (B8)$$

Рівняння (34) зводиться до такого вигляду:

$$\left(\hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)} - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}} \right)^2 = \hat{\mathbf{A}}_1^{(0)} + \frac{1}{4} \hat{\mathbf{1}}, \quad (B9)$$

його розв'язок:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)} = & \frac{1}{2} \hat{\mathbf{1}} + \\
 & + \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{1-\zeta^2}}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{5-\zeta^2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \\
 = & \begin{pmatrix} \frac{4+\sqrt{1-\zeta^2}+3\sqrt{5-\zeta^2}}{8} & \frac{3\sqrt{1-\zeta^2}-3\sqrt{5-\zeta^2}}{8} \\ \frac{\sqrt{1-\zeta^2}-\sqrt{5-\zeta^2}}{8} & \frac{4+3\sqrt{1-\zeta^2}+\sqrt{5-\zeta^2}}{8} \end{pmatrix}. \quad (B10)
 \end{aligned}$$

Матриця $\frac{1}{\mu} \hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)}$ використовується в ролі початкової умови при чисельному інтегруванні рівняння Ріккати (32) на інтервалі $0 < \mu \leq 1$.

2. Інтервал $1 \leq \mu < \infty$

$$\det \hat{\mathbf{P}}(\mu) = \frac{\pi^2}{8} + O\left(\frac{1}{\mu^2}\right), \quad \mu \rightarrow \infty. \quad (B11)$$

Тому матрицю $\hat{\mathbf{S}}^{(\infty)}$ необхідно вибрати такою, щоб $\det \hat{\mathbf{S}}^{(\infty)} \sim 1$. В цій роботі було вибрано матрицю:

$$\hat{\mathbf{S}}^{(\infty)}(\mu) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{\mu}} & -\frac{1}{\sqrt{\mu}} \\ \sqrt{\mu} & \sqrt{\mu} \end{pmatrix}, \quad \det \hat{\mathbf{S}}^{(\infty)} = 2. \quad (B12)$$

Показник степеня $\lambda_{\infty} = -3/4$, що відповідає поведінці пробних функцій $\sim \exp(-\mu^{1/4})$ при $\mu \rightarrow \infty$. Коефіцієнти рівняння (34) мають вигляд

$$\hat{\mathbf{A}}_1^{(\infty)} = \frac{\zeta m R}{4} \hat{\mathbf{1}}, \quad \hat{\mathbf{B}}_1^{(\infty)} \equiv \hat{\mathbf{0}}. \quad (B13)$$

Розв'язок рівняння (34) має вигляд

$$\hat{\mathbf{Y}}_1^{(\infty)} = -\frac{\sqrt{\zeta m R}}{2} \hat{\mathbf{1}}. \quad (B14)$$

Матриця $\frac{1}{\mu^{3/4}} \hat{\mathbf{Y}}_1^{(\infty)}$ використовується в ролі початкової умови при чисельному інтегруванні рівняння Ріккати (32) на інтервалі $1 \leq \mu < \infty$.

1. P.R. Wallace, Phys. Rev. **71**, 622 (1947).
2. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov *et al.*, Science **306**, 666 (2004).
3. G.W. Semenoff, Phys. Rev. Lett. **53**, 2449 (1984).
4. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
5. V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J.P. Carbotte, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 4661 (2007).
6. D.S.L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, Adv. Phys. **59**, 261 (2010).
7. A.F. Young and P. Kim, Nature Phys. **5**, 222 (2009).
8. Y. Wang *et al.*, Science **340**, 734 (2013).

9. I.Ya. Pomeranchuk and Y.A. Smorodinsky, J. Phys. USSR **9**, 97 (1945).
10. Ya.B. Zeldovich and V.N. Popov, Sov. Phys. Usp. **14**, 673 (1972).
11. W. Greiner, B. Müller, and J. Rafelski, *Quantum Electrodynamics of Strong Fields*, (Springer, Berlin, 1985).
12. S.S. Gershtein and Ya.B. Zeldovich, Sov. Phys. JETP **30**, 358 (1970).
13. J. Rafelski, L.P. Fulcher, and W. Greiner, Phys. Rev. Lett. **27**, 958 (1971).
14. B. Müller, H. Peitz, J. Rafelski, and W. Greiner, Phys. Rev. Lett. **28**, 1235 (1972).
15. M.S. Marinov and V.S. Popov, Sov. Phys. JETP **41**, 205 (1975).
16. A.V. Shytov, M.I. Katsnelson, and L.S. Levitov, Phys. Rev. Lett. **99**, 236801 (2007); **99**, 246802 (2007).
17. V.M. Pereira, J. Nilsson, and A.H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. **99**, 166802 (2007).
18. O.V. Gamayun, E.V. Gorbar, and V.P. Gusynin, Phys. Rev. B **80**, 165429 (2009).
19. O.O. Sobol, E.V. Gorbar, and V.P. Gusynin, Phys. Rev. B **88**, 205116 (2013).
20. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции* (Наука, Москва, 1974), Т. 2.
21. V.S. Popov, Sov. J. Nucl. Phys. **14**, 257 (1972).
22. V.S. Popov, Phys. At. Nucl. **64**, 367 (2001).
23. M.S. Marinov, V.S. Popov, and V.L. Stolin, J. Comp. Phys. **19**, 241 (1975).
24. M.I. Katsnelson, *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (Cambridge University Press, New York, 2012).
25. И.С. Градштейн и И.М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, (Гос. изд. физ.-мат. литературы, Москва, 1963).
26. P.F. Byrd and M.D. Friedman, *Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Scientists*, (Springer, Berlin, 1971).

Одержано 12.09.13

А.А. Соболев

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ КРИТИЧЕСКОГО РАССТОЯНИЯ В ЗАДАЧЕ О ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРАХ В ГРАФЕНЕ

Резюме

Исследована надкритическая нестабильность в системе двух заряженных примесей в графене с квазичастицами, которые в непрерывном пределе описываются двумерным уравнением Дирака. Рассмотрен случай, когда заряд каждой из двух одинаковых примесей является субкритическим, тогда как их сумма превосходит критический заряд в задаче об одном кулоновском центре. Развита вариационный метод, с помощью которого вычисляются значения критического расстояния между примесями R_{cr} , как функции полного заряда системы. Установлено, что R_{cr} растёт с увеличением полного заряда двух примесей и с уменьшением ширины квазичастичной щели. Проведено сравнение результатов с данными предшествующих исследований.

O.O. Sobol

VARIATIONAL METHOD FOR THE CALCULATION OF CRITICAL DISTANCE BETWEEN TWO COULOMB CENTERS IN GRAPHENE

Summary

The supercritical instability in a system of two identical charged impurities in gapped graphene described in the continuous limit by the two-dimensional Dirac equation has been studied. The case where the charge of each impurity is subcritical, but their sum exceeds the critical value calculated in the version with a single Coulomb center, is considered. Using the developed variational method, the dependence of the critical distance R_{cr} between the impurities on their total charge is calculated. The R_{cr} -value is found to grow as the total impurity charge increases and the quasiparticle band gap decreases. The results of calculations are compared with those obtained in earlier researches.