ЕЛЕКТРОННА ФУНКЦІЯ ГРІНА ГРАФЕНА В ПОТЕНЦІАЛІ ААРОНОВА–БОМА

А.О. СЛОБОДЕНЮК

Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
(Вул. Метрологічна, 14б, Київ 03143, Україна; e-mail: aslobodeniuk@gmail.com)

УДК 537.633.9

Розглянуто динаміку електронних збуджень (які описуються рівнянням Дірака) у графені в полі Ааронова–Бома. Власні функції і спектр гамільтоніана системи використовуються для побудови електронної функції Гріна. Показано, що вона може бути представлена в інтегральній формі. Обговорено можливе застосування отриманих результатів для чисельних розрахунків електронних властивостей графена.

1. Вступ

Сучасна фізика конденсованого стану отримала великий поштовх у розвитку завдяки відкриттю графена – нової алотропної модифікації вуглецю. Графен – це двовимірний кристал, з гексагональним (сотовим) розташуванням атомів. Як виявилось, він є провідником із незвичним для конденсованих систем спектром електронних збуджень, динаміка яких може бути описана на основі рівняння Дірака, а не Шредінгера, як це зазвичай буває. Наявність такого спектра та істинна двовимірність робить графен прикладом, цікавим з точки зору електронних властивостей. Слід також зауважити, що оскільки поведінка графена може бути описана в рамках теорії поля, він виявився також корисним для підтвердження деяких ефектів квантової електродинаміки.

Значна частина досліджень графена пов'язана із знаходженням залежності його електронних властивостей від зовнішнього магнітного поля. У більшості робіт воно вважається однорідним. Водночас вивчення випадку неоднорідного поля є наступним етапом досліджень [1]. Найбільш простим нетривіальним прикладом такого поля є поле нескінченно-тонкого соленоїда, вектор-потенціал якого відомий як потенціал Ааронова–Бома (ПАБ). З точки зору практичних досліджень, найбільш близьким до ПАБ є вектор-потенціал абрикосовського вихору в надпровідниках II-го роду. Оскільки більшість електронних властивостей речовини можуть бути виражені в термінах функції Гріна (ФГ), знайдемо ФГ двовимірних електронних збуджень у полі АБ, що і становить зміст поставленої задачі.

2. Основні положення

Під ФГ будемо розуміти розв'язок рівняння

$$[E - \widehat{H}(\mathbf{r})]G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \tag{1}$$

де $\widehat{H}(\mathbf{r})$ – гамільтоніан системи, $\mathbf{r}$ – радіус-вектор, E – параметр енергії, який в загальному випадку може набувати комплексних значень. Як відомо, ФГ можна побудувати у вигляді

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\Psi_n(\mathbf{r})\Psi_n^\dagger(\mathbf{r}')}{E - E_n + i0} \tag{2}$$

з власних функцій $\Psi_n(\mathbf{r})$ і власних значень E_n задачі

$$[\widehat{H}(\mathbf{r}) - E_n]\Psi_n(\mathbf{r}) = 0, \tag{3}$$

де (n) – повний набір квантових чисел, що характеризують власну хвильову функцію. Для усунення неоднозначності до (E) додано нескінченно-малий уявний доданок. Під знаком суми слід розуміти підсумовування, коли спектр дискретний, та інтегрування, коли він неперервний. Якщо спектр характеризується як неперервним, так і дискретним квантовим числом, то під сумою слід розуміти інтегрування і підсумовування відповідно.

У випадку рівняння Дірака гамільтоніан і ФГ є матрицями, а розв'язок рівняння Дірака – спінором. Гамільтоніан, який описує електронні збудження у графені, може бути представлений сумою [2]:

$$\widehat{H}(\mathbf{r}) = \widehat{H}(\mathbf{r}, +1) \oplus \widehat{H}(\mathbf{r}, -1). \quad (4)$$

Обидва гамільтоніани $\widehat{H}(\mathbf{r}, \zeta)$, де параметр $\zeta = \pm 1$ відповідає тому чи іншому діраківському конусу, мають однакову структуру

$$\widehat{H}(\mathbf{r}, \zeta) = -i\hbar v_{\mathrm{F}} \gamma_\zeta^0 \gamma_\zeta^j D_j + \gamma_\zeta^0 \Delta, \quad (5)$$

де v_{F} – швидкість Фермі, Δ – величина, що визначає масу збуджень, яка введена для загальності розгляду, а γ-матриці мають такий вигляд:

$$\gamma_\zeta^0 = \sigma_3,\ \gamma_\zeta^1 = i\sigma_2,\ \gamma_\zeta^2 = -i\sigma_1\zeta. \quad (6)$$

Слід відзначити, що представлення γ-матриць (6) є одним з багатьох представлень, які можуть бути використані під час опису графена. Перехід від одного представлення до іншого здійснюється за допомогою деякого унітарного перетворення. Подовжену похідну у рівнянні Дірака записуємо у вигляді

$$D_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - i\frac{e}{\hbar c} A_j, \quad (7)$$

де $e < 0$ – заряд електрона, c – швидкість світла, A_j – компоненти вектор-потенціалу $\mathbf{A}$ у декартових координатах. Оскільки гамільтоніани (5) мають однакову матричну структуру, зручно розглядати їх одночасно, розрізняючи параметром ζ. Пошук власних функцій зводиться до розв'язку системи диференціальних рівнянь, що визначаються гамільтоніанами $\widehat{H}(\mathbf{r}, \zeta)$.

3. Потенціал Ааронова–Бома

Обговоримо також, що будемо розуміти під розв'язками рівняння Дірака в ПАБ. Дослідження розв'язків у потенціалі нескінченно-тонкого соленоїда містить низку труднощів математичної природи, пов'язаних із сингулярністю ПАБ у точці розташування соленоїда [3]. Як було показано в роботі [4], регулярні потенціали, подібні до ПАБ, не містять згаданих вище труднощів (зокрема, розв'язки рівняння Дірака в таких потенціалах визначаються однозначно).

Проте, для того, щоб уникнути необхідності аналізувати розв'язки нефізичного характеру, будемо розглядати розв'язки рівняння Дірака в регулярному потенціалі. Для цього потенціал соленоїдного поля будемо характеризувати розмірним параметром R_s – характерним радіусом соленоїдної трубки. У границі $R_s \to 0$ цей потенціал переходить у ПАБ. Під розв'язками рівняння Дірака, які тепер будуть залежати від параметра R_s, розумітимемо розв'язки регулярної задачі в цій же границі.

4. Розв'язки рівняння Дірака у потенціалі Ааронова–Бома

Розглянемо рівняння руху двовимірного електрона в координатах $\mathbf{r} = (r, \varphi)$ в аксіально-симетричному магнітному полі з вектор-потенціалом

$$\mathbf{A} = \mathbf{e}_\varphi A_\varphi(r). \quad (8)$$

Записавши спінор у вигляді

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ i\psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (9)$$

отримаємо систему рівнянь

$$C_- e^{i\zeta\varphi} \psi_1(\mathbf{r}) - \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i\zeta}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{e\zeta A_\varphi}{\hbar c} \right) \psi_2(\mathbf{r}) = 0, \quad (10)$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i\zeta}{r}\frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e\zeta A_\varphi}{\hbar c} \right) \psi_1(\mathbf{r}) + C_+ e^{-i\zeta\varphi} \psi_2(\mathbf{r}) = 0, \quad (11)$$

де $C_\pm = (E \pm \Delta)/\hbar v_{\mathrm{F}}$.

Розглянемо такий регуляризований вектор-потенціал:

$$A_\varphi^{\mathrm{reg}}(r) = \begin{cases} 0, & r < R; \\ \frac{\hbar c}{|e|}\frac{\eta}{r}, & r > R. \end{cases} \quad (12)$$

Безрозмірний параметр $\eta \in [0, 1)$ визначає величину потоку магнітного поля $\eta\Phi_0$, що міститься в соленоїдній трубці, де $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$. Розривність потенціалу визначає такі умови зшивки для радіальних компонент спінора $\psi_1(r)$, $\psi_2(r)$ – верхньої і нижньої відповідно:

$$\psi_1'(R_s + 0) - \psi_1'(R_s - 0) = \frac{\zeta\eta}{R_s}\psi_1(R_s),$$

$$\psi_1(R_s + 0) = \psi_1(R_s - 0), \quad (13)$$

$$\psi_2'(R_s + 0) - \psi_2'(R_s - 0) = -\frac{\zeta\eta}{R_s}\psi_2(R_s),$$

$$\psi_2(R_s + 0) = \psi_2(R_s - 0), \quad (14)$$

де штрих означає диференціювання по r. Для пошуку функцій $\psi_1(r)$ і $\psi_2(r)$ слід перейти від системи рівнянь (10), (11) до системи диференціальних рівнянь другого порядку на кожну з компонент спінора окремо. При цьому отримана система рівнянь і граничних умов для $\zeta = 1$, переходить в систему рівнянь і граничних умов для $\zeta = -1$ з відповідною заміною $\psi_1(r) \leftrightarrow \psi_2(r)$. Тому без обмеження загальності досить розглянути задачу для випадку $\zeta = 1$. Введемо позначення $E(\mathbf{k}) = \sqrt{(\hbar v_{\mathrm{F}})^2 k^2 + \Delta^2}$, де $\mathbf{k}$ – двовимірний хвильовий вектор, k – його модуль. Нормовані розв'язки рівняння Дірака з коефіцієнтом нормування

$$C_m = \sqrt{\frac{k}{4\pi E(\mathbf{k})}}\, e^{im\varphi} \tag{15}$$

у границі $R_s \to 0$ мають такий вигляд для додатних значень енергії ($E = E(\mathbf{k})$):

$$\Psi_m^{(+)}(\mathbf{r}) = C_m \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\sqrt{E(\mathbf{k}) + \Delta} J_{|m+\eta-1|}(kr) \\ \pm i\sqrt{E(\mathbf{k}) - \Delta} J_{|m+\eta|}(kr) \end{pmatrix}, \tag{16}$$

а для від'ємних значень енергії $E = -E(\mathbf{k})$ –

$$\Psi_m^{(-)}(\mathbf{r}) = C_m \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\sqrt{E(\mathbf{k}) - \Delta} J_{|m+\eta-1|}(kr) \\ \mp i\sqrt{E(\mathbf{k}) + \Delta} J_{|m+\eta|}(kr) \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Верхній знак другої компоненти відповідає додатним значенням m, а нижній – від'ємним. При $m = 0$ для додатних значень енергії $E = E(\mathbf{k})$:

$$\Psi_0^{(+)}(\mathbf{r}) = C_0 \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\sqrt{E(\mathbf{k}) + \Delta} J_{1-\eta}(kr) \\ -i\sqrt{E(\mathbf{k}) - \Delta} J_{-\eta}(kr) \end{pmatrix}, \tag{18}$$

а для від'ємних значень енергії $E = -E(\mathbf{k})$ –

$$\Psi_0^{(-)}(\mathbf{r}) = C_0 \begin{pmatrix} e^{-i\varphi}\sqrt{E(\mathbf{k}) - \Delta} J_{1-\eta}(kr) \\ i\sqrt{E(\mathbf{k}) + \Delta} J_{-\eta}(kr) \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Зауважимо, що при $m = 0$ система рівнянь Дірака має два квадратично інтегровані лінійно незалежні розв'язки. Ця неоднозначність пов'язана з сингулярністю ПАБ. Розгляд регуляризованого потенціалу (12) не містить цих труднощів і однозначно визначає розв'язок у цьому випадку.

5. Побудова функції Гріна системи

Електронна ФГ графена в ПАБ визначається її діагональними елементами. Дійсно, з рівняння (1) випливають такі рівності для недіагональних матричних елементів ФГ (нагадаємо, що внаслідок сказаного вище подальші розрахунки відповідають випадку $\zeta = 1$):

$$G_{12}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') =$$

$$= \frac{e^{-i\varphi}}{iC_-}\left(\frac{\partial}{\partial r} - i\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\eta}{r}\right) G_{22}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}'), \tag{20}$$

$$G_{21}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') =$$

$$= \frac{e^{i\varphi}}{iC_+}\left(\frac{\partial}{\partial r} + i\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\eta}{r}\right) G_{11}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \tag{21}$$

Введемо позначення $q = \sqrt{E^2 - \Delta^2}/\hbar v_{\mathrm{F}}$; тоді діагональні елементи ФГ можуть бути записані у такому вигляді:

$$G_{11}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{(E + \Delta)}{2\pi(\hbar v_{\mathrm{F}})^2}\int\limits_0^\infty \frac{kdk\, G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{q^2 - k^2 + i0\mathrm{sgn}E}, \tag{22}$$

$$G_{22}(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{(E - \Delta)}{2\pi(\hbar v_{\mathrm{F}})^2}\int\limits_0^\infty \frac{kdk\, G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')}{q^2 - k^2 + i0\mathrm{sgn}E}, \tag{23}$$

де

$$G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} J_{|m+\eta|}(kr) J_{|m+\eta|}(kr'), \tag{24}$$

$$G_{22}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') - \sum_{\alpha=\pm 1} \mathrm{sgn}\alpha\; J_{\alpha\eta}(kr) J_{\alpha\eta}(kr'). \tag{25}$$

Як видно, для знаходження (22) та (23) необхідно вирахувати вирази

$$F_1(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int\limits_0^\infty \frac{kdk}{q^2 - k^2 + i0\mathrm{sgn}E} \times$$

$$\times \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')} J_{|m+\eta|}(kr) J_{|m+\eta|}(kr'), \tag{26}$$

і

$$F_2(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int\limits_0^\infty \frac{kdk}{q^2 - k^2 + i0\mathrm{sgn}E} \times$$

$$\times [J_{-\eta}(kr) J_{-\eta}(kr') - J_\eta(kr) J_\eta(kr')]. \tag{27}$$

Величину (26) розрахуємо, використовуючи метод, запропонований у [5]. Розглянемо аналітичне продовження функції, що задається за правилом $q + +i0\mathrm{sgn}E \to z = iQ\mathrm{sgn}E$:

$$F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\int\limits_0^\infty \frac{kdk}{Q^2+k^2}\sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi-\varphi')}\times$$

$$\times J_{|m+\eta|}(kr)J_{|m+\eta|}(kr'). \tag{28}$$

Величина $\theta = \varphi - \varphi'$ набуває значення з інтервалу $[-\pi,\pi]$. Абсолютне значення θ визначає менший з кутів між радіус-векторами $\mathbf{r}$ і $\mathbf{r}'$, а знак – взаємне їх розташування. Кути $\theta = \pm\pi$ визначають одне і те саме розташування радіус-векторів. Розрахуємо кожний інтеграл суми за допомогою рівності [6]:

$$\int\limits_0^\infty \frac{kdk}{Q^2+k^2}J_{|m+\eta|}(kr)J_{|m+\eta|}(kr') =$$

$$= I_{|m+\eta|}(Qr_-)K_{|m+\eta|}(Qr_+), \tag{29}$$

де r_- і r_+ – менший і більший з радіусів r, r'. Розглянемо випадок, коли $r_- = r$ та $r_+ = r'$ (коли $r_- = r'$ і $r_+ = r$, то відповідь для ФГ зводиться до заміни $r \leftrightarrow r'$ у ФГ, отриманої з урахуванням першої прескрипції). Використаємо інтегральні представлення для циліндричних функцій [7]:

$$I_\nu(z) = \frac{1}{2\pi i}\int\limits_C e^{z\,\mathrm{ch}\,\omega - \nu\omega}d\omega, \tag{30}$$

$$K_\nu(z) = \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-z\,\mathrm{ch}\,v - \nu v}dv, \tag{31}$$

де контур інтегрування C починається і закінчується в точках $-i\pi+\infty$ і $i\pi+\infty$ відповідно. Запишемо суму (28), розкриваючи модулі індексів циліндричних функцій:

$$F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dv\int\limits_C d\omega S(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}')\times$$

$$\times e^{Qr\,\mathrm{ch}\,\omega - Qr'\,\mathrm{ch}\,v}, \tag{32}$$

де

$$S(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \sum_{m=0}^{\infty} e^{im\theta}e^{-(m+\eta)(v+\omega)}+$$

$$+\sum_{m=1}^{\infty} e^{-im\theta}e^{-(m-\eta)(v+\omega)}. \tag{33}$$

Для розрахунку функції $F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ використаємо такий прийом. Розглянемо

$$F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}',a) = -\frac{1}{4\pi i}\int\limits_{-a}^{\infty} dv\int\limits_C d\omega S(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}')\times$$

$$\times e^{Qr\,\mathrm{ch}\,\omega - Qr'\,\mathrm{ch}\,v}, \tag{34}$$

де a – додатне дійсне число. Величину $F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ будемо шукати як границю $F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}',a)$ при $(a\to\infty)$. Виберемо контур інтегрування C так, щоб виконувалась умова $(\mathrm{Re}\omega > a)$. Завдяки їй можна просумувати ряди в (33), використовуючи властивості геометричної прогресії:

$$S(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{e^{-\eta(v+\omega)}}{1-e^{i\theta-(\omega+v)}} - \frac{e^{\eta(v+\omega)}}{1-e^{i\theta+(\omega+v)}}. \tag{35}$$

Неважко пересвідчитися, що при заміні змінних $(v \to -v)$ у першому і $\omega \to -\omega$ у другому доданках, вони набувають однакового вигляду. При такій заміні змінних функція (34) може бути зведена до вигляду

$$F_1(Q,\mathbf{r},\mathbf{r}',a) = \frac{1}{4\pi i}\left(\int\limits_{-\infty}^{a}dv\int\limits_C d\omega + \int\limits_{-a}^{\infty}dv\int\limits_{C'}d\omega\right)\times$$

$$\times\frac{e^{\eta(v-\omega)}}{e^{i\theta+v-\omega}-1}e^{Q(r\,\mathrm{ch}\,\omega - r'\,\mathrm{ch}\,v)}, \tag{36}$$

де C' – контур, симетричний C відносно початку координат. Розглянемо границю $a\to\infty$ і використаємо таку тотожність:

$$\int\limits_C d\omega f(\omega) + \int\limits_{C'} d\omega f(\omega) =$$

$$= \int\limits_{i\pi-\infty}^{i\pi+\infty} d\omega f(\omega) + \int\limits_{-i\pi+\infty}^{-i\pi-\infty} d\omega f(\omega) + \oint\limits_{C''} d\omega f(\omega), \tag{37}$$

де C'' – прямокутний контур довжиною, більшою за $2a$ і шириною $2\pi i$, який обходиться проти годинникової стрілки, тобто

$$F_1(Q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = I_1 + I_2, \tag{38}$$

де

$$I_1 = -\frac{1}{4\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \oint d\omega \frac{e^{\eta(v-\omega)}}{1 - e^{i\theta + v - \omega}} e^{Q(r \operatorname{ch}\omega - r' \operatorname{ch} v)}, \tag{39}$$

$$I_2 = \frac{\sin \pi\eta}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dv \int\limits_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{\eta(v-\omega)}}{1 + e^{i\theta + v - \omega}} e^{-Q(r \operatorname{ch}\omega + r' \operatorname{ch} v)}. \tag{40}$$

Розрахунок першого інтеграла не містить труднощів у випадку $\theta \neq \pi$, оскільки всередині контуру C'' знаходиться лише один полюс підінтегральної функції. У випадку $\theta = \pi$ потрібно врахувати, що два полюси підінтегральної функції знаходяться на межі контуру. Розрахувавши інтеграл по контуру і використавши інтегральне представлення для функції Макдональда, знайдемо

$$I_1 = \begin{cases} -e^{-i\eta\theta} K_0(QR), & \theta \neq \pm\pi; \\ -\cos \pi\eta K_0(QR), & \theta = \pm\pi. \end{cases} \tag{41}$$

де $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Виходячи з інтегрального представлення для функції Макдональда, другий інтеграл зводиться до однократного, так що

$$I_2 = \frac{\sin \pi\eta}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{\eta x}}{1 + e^{i\theta + x}} K_0(QR_x), \tag{42}$$

де $R_x = (r^2 + r'^2 + 2rr' \operatorname{ch} x)^{1/2}$. Останній інтеграл навіть у простих випадках приводить до досить громіздких виразів, використання яких не спрощує розрахунків, що вимагають використання ФГ, і зазвичай явний вигляд інтеграла (42) або його асимптотичну поведінку треба досліджувати в кожній задачі окремо. Тому збережемо цей доданок в інтегральній формі.

Зворотний перехід $Q \to -iqsgnE$ дозволяє виписати остаточний вираз, а саме:

$$F_1(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mp\frac{i\pi}{2} e^{-i\eta\theta} H_0^{(j)}(qR) \pm$$

$$\pm \frac{i \sin \pi\eta}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{\eta x}}{1 + e^{i\theta + x}} H_0^{(j)}(qR_x), \tag{43}$$

де $j = 1, 2$ та верхній і нижній знаки беруться для $E > 0$ та $E < 0$, відповідно, коли $\theta \neq \pi$; і

$$F_1(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mp\frac{i\pi}{2} \cos \pi\eta H_0^{(j)}(qR) \pm$$

$$\pm \frac{i \sin \pi\eta}{2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dx \frac{e^{\eta x}}{1 - e^{x}} H_0^{(j)}(qR_x), \tag{44}$$

де вибір знаків і значень j аналогічний формулі (43), а інтеграл розуміють у сенсі головного значення при рівності $\theta = \pm\pi$. Остання рівність отримана з використанням тотожностей [8]:

$$K_\nu(iz) = -\frac{i\pi}{2} e^{-i\pi\nu/2} H_\nu^{(2)}(z),$$

$$K_\nu(-iz) = \frac{i\pi}{2} e^{i\pi\nu/2} H_\nu^{(1)}(z). \tag{45}$$

Розрахуємо тепер вираз $F_2(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$, розглядаючи його аналітичне продовження:

$$F_2(Q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int\limits_0^\infty \frac{kdk}{Q^2 + k^2} \sum_{\alpha = \pm 1} \operatorname{sgn}\alpha\, J_{\alpha\eta}(kr) J_{\alpha\eta}(kr'). \tag{46}$$

Використовуючи формулу (29) і запис функції Макдональда $K_\nu(z)$ через модифіковані функції Бесселя $I_\nu(z)$ [8]:

$$K_\nu(z) = \frac{\pi}{2 \sin \pi\nu}[I_{-\nu}(z) - I_\nu(z)], \tag{47}$$

отримуємо такий вираз:

$$F_2(Q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{2 \sin \pi\eta}{\pi} K_\eta(Qr) K_\eta(Qr'). \tag{48}$$

Аналогічно першому виразу знаходимо

$$F_2(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\pi \sin \pi\eta}{2} e^{\pm i\pi\eta} H_\eta^{(j)}(qr) H_\eta^{(j)}(qr'), \tag{49}$$

де $j = 1, 2$ та верхній і нижній знаки беруться для $E > 0$ та $E < 0$ відповідно. З отриманих виразів $F_1(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ і $F_2(q, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ будується ФГ, що дозволяє зробити висновок: задача знаходження електронної ФГ графена, який містить соленоїдальне поле (іншою мовою, ПАБ), фактично розв'язана.

6. Висновок

Знайдена ФГ суттєво відрізняється від ФГ вільної діраківської частинки [9]. Така відмінність пояснюється дальнодійним характером ПАБ. А отже, за наявності в графені структур, що характеризуються потоком магнітного поля, для розрахунку електронних властивостей такої системи, природно використовувати отриману вище ФГ, у ролі основного наближення.

Наведемо два приклади таких систем. До першого відносяться системи з магнітними домішками, як наприклад у [10], де вивчався їх вплив на провідність двовимірного електронного газу. До другого прикладу відноситься графен з дефектами його кристалічної ґратки. Як було показано в роботах [11, 12], рівняння, що визначають динаміку електронних збуджень у графені з дефектами, еквівалентні рівнянням, що описують ідеальний графен за наявності додаткових ПАБ, розташування центрів яких збігається з розташуванням дефектів. Це спостереження дозволяє визначити внесок дефектів графена в його електронні властивості в рамках польового підходу.

Створення двовимірної електронної системи з магнітним вихором тепер не містить труднощів [13, 14]. Це дає можливість визначити ефективність використання відповідної ФГ у розрахунках електронних властивостей графена за допомогою скануючої тунельної мікроскопії [15].

Автори висловлюють подяку П.І. Голоду, В.П. Гусиніну, В.М. Локтєву, Ю.О. Ситенку та С.Г. Шарапову за стимулюючі дискусії відносно даної роботи. Роботу виконано за підтримки гранта SCOPES No. IZ73Z0_128026 Швейцарської NSF, SIMTECH № 246937 європейської програми FP7 та програми фундаментальних досліджень відділу фізики і астрономії НАН України.

1. T. Champel and S. Florens, Phys. Rev. B **82**, 045421 (2010).
2. V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J.P. Carbotte, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 4611 (2007).
3. Yu.A. Sitenko, Phys. Lett. B **387**, 334 (1996).
4. C.R. Hagen, Phys. Rev. Lett., **64**, 503 (1990).
5. E.C. Marino, B. Schroer, and J.C. Swieca, Nucl. Phys. B, **200**, 437 (1982).
6. А.П. Прудников, Ю.А. Брычков, О.И. Маричев, *Интегралы и ряды. Специальные функции* (Наука, Москва, 1983).
7. А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров, *Специальные функции математической физики* (Наука, Москва, 1978).
8. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции. Функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены* (Наука, Москва, 1974).
9. R. Jackiw, A.I. Milstein, S.-Y. Pi, and I.S. Terekhov, Phys. Rev. B **80**, 033413 (2009).
10. J. Desbois, S. Ouvry, and C. Texier, Nucl. Phys. B **500**, 486 (1997).
11. A. Cortijo and M.A.H. Vozmediano, Nucl. Phys. B **763**, 293 (2007).
12. Yu.A. Sitenko and N.D.Vlasii, Nucl. Phys. B **787**, 241 (2007).
13. A.K. Geim, S.J. Bending, and I.V. Grigorieva, Phys. Rev. Lett. **69**, 2252 (1992).
14. S.J. Bending, K. von Klitzing, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **65**, 1060 (1990).
15. A. Cano and I. Paul, Phys. Rev. B **80**, 153401 (2009).

Одержано 07.06.10

ЭЛЕКТРОННАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА ГРАФЕНА
В ПОТЕНЦИАЛЕ ААРОНОВА–БОМА

А.А. Слободенюк

Р е з ю м е

Рассмотрена динамика электронных возмущений (которые описываются уравнением Дирака) в графене в поле Ааронова–Бома. Собственные функции и спектр гамильтониана системы используются для построения электронной функции Грина. Показано, что она может быть представлена в интегральной форме. Обсуждено возможное использование полученных результатов для численных расчетов электронных свойств графена.

ELECTRON GREEN'S FUNCTION OF GRAPHENE
IN THE AHARONOV–BOHM POTENTIAL

A.O. Slobodeniuk

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics,
Nat. Acad. of Sci. of Ukraine
(*14b, Metrolohichna Str., Kyiv 03143, Ukraine;*
e-mail: aslobodeniuk@gmail.com)

S u m m a r y

The dynamics of electron excitations, which are described by the Dirac equation, in the Aharonov–Bohm field has been studied. The eigenfunctions and the spectrum of the Hamiltonian of a system have been used to construct the integral formula for the electron Green's function. Possible applications of the results obtained to numerically calculate the electronic properties of graphene have been discussed.