Доповіді
Національної
академії наук
України

5 • 2011

ФІЗИКА

УДК 537.633.9

© 2011

А. О. Слободенюк

Розв'язки рівняння Дірака у неоднорідному магнітному полі

(Представлено академіком НАН України В. М. Локтевим)

Досліджується вплив неоднорідностей магнітного поля на динаміку електронних збуджень в графені. Розглядається графен у постійному магнітному полі і полі Ааронова–Бома. Знаходяться власні функції і спектр гамільтоніана відповідної системи. Отримані розв'язки порівнюються з розв'язками при постійному магнітному полі.

1. Електронні властивості графена — моношару атомів вуглецю — активно досліджуються як теоретично, так і експериментально. Особливості енергетичного спектра і двовимірність структури роблять його відмінним від багатьох інших матеріалів. Низькоенергетичні електронні збудження в графені при відсутності неоднорідностей його гратки добре описуються парою двовимірних рівнянь Дірака.

Значна частина досліджень графена пов'язана з вивченням його електронних властивостей у постійному магнітному полі. У зв'язку з цим цікавим є питання щодо ролі неоднорідностей магнітного поля в досліджуваних системах. Прикладом такої неоднорідності може бути потенціал Ааронова–Бома (ПАБ). З точки зору експерименту, найбільш близьким до ПАБ є вектор-потенціал вихору Абрикосова в надпровідниках II роду.

Вивчення впливу неоднорідності магнітного поля зводиться до пошуку власних функцій і власних значень гамільтоніана системи, що є змістом поставленої нами задачі, оскільки вони є необхідною складовою при обчисленні будь-яких спостережуваних.

2. Динаміка електронних збуджень у графені описується парою двовимірних гамільтоніанів Дірака [1]

$$\widehat{H}(\mathbf{r},\zeta) = -i\hbar v_F \gamma^0_\zeta \gamma^j_\zeta D_j + \gamma^0_\zeta \Delta. \tag{1}$$

Параметр $\zeta = \pm 1$ відповідає першому і другому діраківським конусам, v_F — швидкість Фермі, Δ — величина, що визначає масу збуджень, введена для загальності розгляду, а γ-матриці мають такий вигляд:

$$\gamma^0_\zeta = \sigma_3, \qquad \gamma^1_\zeta = i\sigma_2, \qquad \gamma^2_\zeta = -i\sigma_1\zeta. \tag{2}$$

Відзначимо, що зображення γ-матриць (2) є одне з багатьох зображень, які можуть бути використані для опису графена. Перехід від одного зображення до іншого здійснюється за допомогою деякого унітарного перетворення. Подовжена похідна в (1) записується так:

$$D_j = \frac{\partial}{\partial x_j} - i\frac{e}{\hbar c}A_j, \tag{3}$$

де $e < 0$ — заряд електрона; c — швидкість світла; A_j — компоненти вектор-потенціалу $\mathbf{A}$ у декартових координатах.

Оскільки гамільтоніани (1) мають однакову матричну структуру, розглядатимемо їх одночасно, розрізняючи параметром ζ. Задача на власні значення і власні функції має звичайний вигляд

$$\widehat{H}(\mathbf{r},\zeta)\Psi(\mathbf{r},\zeta) = E\Psi(\mathbf{r},\zeta), \tag{4}$$

де $\Psi(\mathbf{r},\zeta)$ є двовимірним спінором, а E — спектр енергій гамільтоніанів. Вона зводиться до розв'язання рівнянь Дірака в присутності постійного магнітного поля і ПАБ.

3. При відшуканні розв'язків відповідних диференційних рівнянь в присутності ПАБ виникають труднощі математичного характеру, які пов'язані з його сингулярністю [2]. Щоб уникнути цієї проблеми, введемо центрально-симетричний регуляризований потенціал, який залежить від розмірного параметра R. Параметр визначає відстань (яка відраховується від центра симетрії системи), починаючи з якої регуляризований потенціал збігається з ПАБ. При цьому потік магнітного поля, що міститься в крузі радіусом R, повинен збігається з потоком ПАБ. Під розв'язками рівняння Дірака будемо розуміти розв'язок відповідної регулярної задачі в границі $R \to 0$.

Як було показано в [3], остаточна відповідь не залежить від вигляду регуляризованого потенціалу, а визначається лише величиною магнітного потоку ПАБ. Тому для побудови розв'язків регулярної задачі виберемо потенціал

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_\varphi(r)\mathbf{e}_\varphi, \qquad A_\varphi(r) = \frac{Br}{2} + \frac{\hbar c}{|e|}\frac{\eta}{r}\theta(r-R), \tag{5}$$

де $\eta \in [0,1)$ характеризує величину потоку магнітного поля $\Phi = \eta\Phi_0$ в одиницях $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$; $\theta(x)$ — сходинкова функція, а B — величина зовнішнього магнітного поля, перпендикулярного до площини графена.

4. Зведемо задачу (4) до системи диференційних рівнянь. Оскільки потенціал (5) є аксіально-симетричним, зручно перейти до полярних координат $\mathbf{r} = (r,\varphi)$. Запишемо спінор у такому вигляді:

$$\Psi(\mathbf{r},\zeta) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r},\zeta) \\ i\psi_2(\mathbf{r},\zeta) \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Тоді система рівнянь Дірака набуває вигляду

$$(E-\Delta)\psi_1(\mathbf{r},\zeta) - \hbar v_F e^{-i\zeta\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i\zeta}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{e\zeta A_\varphi(r)}{\hbar c}\right)\psi_2(\mathbf{r},\zeta) = 0, \tag{7}$$

$$\hbar v_F e^{i\zeta\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{i\zeta}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e\zeta A_\varphi(r)}{\hbar c}\right)\psi_1(\mathbf{r},\zeta) + (E+\Delta)\psi_2(\mathbf{r},\zeta) = 0. \tag{8}$$

Розривність потенціалу (5) визначає такі умови зшивки для радіальних компонент спінора $\psi_1(r,\zeta)$, $\psi_2(r,\zeta)$:

$$\psi_1'(R+0,\zeta)-\psi_1'(R-0,\zeta)=\frac{\zeta\eta}{R}\psi_1(R,\zeta), \qquad \psi_1(R+0,\zeta)=\psi_1(R-0,\zeta), \tag{9}$$

$$\psi_2'(R+0,\zeta)-\psi_2'(R-0,\zeta)=-\frac{\zeta\eta}{R}\psi_2(R,\zeta), \qquad \psi_2(R+0,\zeta)=\psi_2(R-0,\zeta), \tag{10}$$

де штрих означає диференціювання за r.

5. Розглянемо систему рівнянь для першого діраківського конуса, тобто при $\zeta=1$ (випадок $\zeta=-1$ розглядається аналогічно). Розв'язок шукатимемо у вигляді

$$\psi_1(\mathbf{r},1)=e^{i(m-1)\varphi}\psi_1(r), \qquad \psi_2(\mathbf{r},1)=e^{im\varphi}\psi_2(r). \tag{11}$$

Рівняння на радіальні компоненти спінора записуються таким чином:

$$\psi_1(r)=\frac{\hbar v_F}{E-\Delta}\left(\frac{d}{dr}+\frac{m+\eta\theta(r-R)}{r}+\frac{r}{2l^2}\right)\psi_2(r), \tag{12}$$

$$\psi_2(r)=-\frac{\hbar v_F}{E+\Delta}\left(\frac{d}{dr}-\frac{m+\eta\theta(r-R)-1}{r}-\frac{r}{2l^2}\right)\psi_1(r). \tag{13}$$

Перейдемо до безрозмірних координат $y=r^2/2l^2$, де $l=(\hbar c/|e|B)^{1/2}$ — магнітна довжина. Подамо (12) і (13) у формі, зручній для подальшого аналізу. В області $y\in[0,\rho]$ система зводиться до вигляду:

$$\psi_1(y)=\frac{\hbar v_F}{(E-\Delta)l}\frac{1}{\sqrt{2y}}\left(2y\frac{d}{dy}+m+y\right)\psi_2(y), \tag{14}$$

$$\psi_2(x)=-\frac{\hbar v_F}{(E+\Delta)l}\frac{1}{\sqrt{2y}}\left(2y\frac{d}{dy}-(m-1)-y\right)\psi_1(y), \tag{15}$$

а в області $y\in[\rho,\infty)$ —

$$\psi_1(y)=\frac{\hbar v_F}{(E-\Delta)l}\frac{1}{\sqrt{2y}}\left(2y\frac{d}{dy}+(m+\eta)+y\right)\psi_2(y), \tag{16}$$

$$\psi_2(x)=-\frac{\hbar v_F}{(E+\Delta)l}\frac{1}{\sqrt{2y}}\left(2y\frac{d}{dy}-(m+\eta-1)-y\right)\psi_1(y). \tag{17}$$

Умови зшивки в нових координатах стандартні

$$\psi_1'(\rho+0)-\psi_1'(\rho-0)=\frac{\eta}{2\rho}\psi_1(\rho), \qquad \psi_1(\rho-0)=\psi_1(\rho+0), \tag{18}$$

$$\psi_2'(\rho+0)-\psi_2'(\rho-0)=-\frac{\eta}{2\rho}\psi_2(\rho), \qquad \psi_2(\rho-0)=\psi_2(\rho+0), \tag{19}$$

де тепер штрих означає диференціювання за y, а $\rho=R^2/2l^2$ — параметр, який характеризує розмір регуляризованого потенціалу в нових змінних. Зведемо (14)–(17) до рівнянь другого порядку на кожну компоненту спінора окремо. Для області $y\in[0,\rho]$ маємо систему:

$$\left\{\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d}{dy}-\frac{1}{y^2}\left(\frac{(m-1)^2}{4}+\frac{y^2}{4}+\frac{m-1}{2}y-\frac{\varepsilon-1}{2}y\right)\right\}\psi_1(y)=0, \tag{20}$$

$$\left\{\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d}{dy}-\frac{1}{y^2}\left(\frac{m^2}{4}+\frac{y^2}{4}+\frac{m}{2}y-\frac{\varepsilon+1}{2}y\right)\right\}\psi_2(y)=0. \tag{21}$$

Тут $\varepsilon=(E^2-\Delta^2)l^2/(\hbar v_F)^2$ — безрозмірна величина, яка визначає спектр. Рівняння для області $y\in[\rho,\infty)$ отримуються з попередніх двох заміною $m\to m+\eta$ і відносяться до рівнянь гіпергеометричного типу [4]:

$$\left\{\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d}{dy}-\frac{1}{y^2}\left(\frac{(m+\eta-1)^2}{4}+\frac{y^2}{4}+\frac{m+\eta-1}{2}y-\frac{\varepsilon-1}{2}y\right)\right\}\psi_1(y)=0, \tag{22}$$

$$\left\{\frac{d^2}{dy^2}+\frac{1}{y}\frac{d}{dy}-\frac{1}{y^2}\left(\frac{(m+\eta)^2}{4}+\frac{y^2}{4}+\frac{m+\eta}{2}y-\frac{\varepsilon+1}{2}y\right)\right\}\psi_2(y)=0. \tag{23}$$

Умови квадратичної інтегрованості і зшивки визначають вигляд хвильових функцій. При цьому кожна радіальна компонента $\psi_1(r)$ і $\psi_2(r)$ залежатиме від ρ.

Як було сказано вище, шукана відповідь визначається асимптотичним значенням спектра і власних спінорів при прямуванні цього параметра до нуля. Неважко бачити, що при $\rho\to 0$ область визначення (22) і (23) переходить на всю площину. Тому граничні розв'язки повинні задовольняти цю систему диференційних рівнянь або аналогічну їй (16) і (17).

6. Отримаємо власні значення і власні функції розглянутої вище системи (14)–(17). В границі $\rho\to 0$ спектр легко записати:

$$E=\pm E_{n,m}=\pm\sqrt{\Delta^2+\varepsilon_0^2(2n+|m+\eta-1|+m+\eta+1)},\qquad E=-\Delta, \tag{24}$$

де n — невід'ємні цілі числа; m пробігає множину цілих чисел, а $\varepsilon_0=\hbar v_F/l$ — характерний масштаб енергій в системі. Надалі під $E_{n,m}$ розумітимемо додатну величину квадратного кореня.

Відзначимо таку особливість розглядуваної задачі. Спектром (22) є набір чисел $\pm E_{n,m}$. З аналізу (23) випливає, що крім $\pm E_{n,m}$ це рівняння містить додаткові власні значення з абсолютною величиною $|E|=\Delta$. Зрозуміло, що спінор, який відповідає цій енергії, має нульову першу компоненту $\psi_1(r)=0$ і повинен задовольняти систему (16), (17). Обидві умови виконуються лише при одному із двох значень енергії $\pm\Delta$, а саме, коли $E=-\Delta$. Неважко переконатися, що таке власне значення можливе лише при $n=0$ і $m\leqslant 0$.

Для запису розв'язків зручно використати такий вираз [5]:

$$J_\nu^n(\xi)=\sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+\nu+1)}}e^{-\xi/2}\xi^{\nu/2}L_n^\nu(\xi), \tag{25}$$

де $L_n^\nu(\xi)$ — узагальнений поліном Лагерра степеня n і параметром $\nu>-1$.

Розглянемо випадок $E=\pm E_{n,m}$. При $m>0$ отримуємо:

$$\Psi^{\pm}{}_{n,m}(\mathbf{r},1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,m}}}\begin{pmatrix}\sqrt{E_{n,m}\pm\Delta}e^{i(m-1)\varphi}J_{m+\eta-1}^n(y)\\ \pm\sqrt{E_{n,m}\mp\Delta}e^{im\varphi}J_{m+\eta}^n(y)\end{pmatrix}; \tag{26}$$

для $m=0$ —

$$\Psi^{\pm}{}_{n,0}(\mathbf{r},1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,0}}}\begin{pmatrix}\sqrt{E_{n,0}\pm\Delta}e^{-i\varphi}J_{1-\eta}^n(y)\\ \mp\sqrt{E_{n,0}\mp\Delta}J_{-\eta}^{n+1}(y)\end{pmatrix} \tag{27}$$

і для $m < 0$ —

$$\Psi^{\pm}{}_{n,m}(\mathbf{r},1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,m}}}\begin{pmatrix}\sqrt{E_{n,m}\pm\Delta}e^{i(m-1)\varphi}J^{n}_{|m+\eta-1|}(y)\\ \mp\sqrt{E_{n,m}\mp\Delta}e^{im\varphi}J^{n+1}_{|m+\eta|}(y)\end{pmatrix}. \tag{28}$$

Нарешті розглянемо $E=-\Delta$. Як було сказано вище, власні спінори існують при $n=0$, $m\leqslant 0$ і мають вигляд

$$\Psi_{0,m}(\mathbf{r},1)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}l}\begin{pmatrix}0\\ e^{im\varphi}J^{0}_{|m|-\eta}(y)\end{pmatrix}. \tag{29}$$

Одержані розв'язки при $B\to 0$ переходять у хвильові функції неперервного спектра [6] і в хвильові функції для графена в постійному магнітному полі при $\eta\to 0$. Слід також відзначити сингулярну поведінку розв'язків при $m=0$, якої немає при відсутності ПАБ.

7. Аналогічним чином можна отримати спектр і розв'язки задачі для другого діраківського конуса. Випишемо їх для загальності.

Спектр рівняння Дірака при $\zeta=-1$ набуває форми

$$E=\pm E_{n,m},\qquad E=\Delta. \tag{30}$$

Для випадку $E=\pm E_{n,m}$ розв'язки при $m>0$ записуються таким чином:

$$\Psi^{\pm}{}_{n,m}(\mathbf{r},-1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,m}}}\begin{pmatrix}\mp\sqrt{E_{n,m}\pm\Delta}e^{im\varphi}J^{n}_{m+\eta}(y)\\ \sqrt{E_{n,m}\mp\Delta}e^{i(m-1)\varphi}J^{n}_{m+\eta-1}(y)\end{pmatrix}; \tag{31}$$

для $m=0$ —

$$\Psi^{\pm}{}_{n,0}(\mathbf{r},-1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,0}}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{E_{n,0}\pm\Delta}J^{n+1}_{-\eta}(y)\\ \sqrt{E_{n,0}\mp\Delta}e^{-i\varphi}J^{n}_{1-\eta}(y)\end{pmatrix} \tag{32}$$

і для $m < 0$ —

$$\Psi^{\pm}{}_{n,m}(\mathbf{r},-1)=\frac{1}{2l\sqrt{\pi E_{n,m}}}\begin{pmatrix}\pm\sqrt{E_{n,m}\pm\Delta}e^{im\varphi}J^{n+1}_{|m+\eta|}(y)\\ \sqrt{E_{n,m}\mp\Delta}e^{i(m-1)\varphi}J^{n}_{|m+\eta-1|}(y)\end{pmatrix}. \tag{33}$$

Розглянемо електронні збудження, що відповідають енергії $E=\Delta$. Власні спінори існують при умові $n=0$, $m\leqslant 0$:

$$\Psi_{0,m}(\mathbf{r},-1)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}l}\begin{pmatrix}e^{im\varphi}J^{0}_{|m|-\eta}(y)\\ 0\end{pmatrix}. \tag{34}$$

8. Додавання до системи з постійним магнітним полем ПАБ призводить до істотної зміни розв'язків відповідних диференційних рівнянь. Тому природно використовувати їх при дослідженні властивостей графена зі структурами, які характеризуються потоком магнітного поля (наприклад, магнітними домішками [7]).

Іншим прикладом подібних структур є точкові дефекти. Такі особливості гратки графена, неоднорідності його поверхні або її натяг в термінах рівняння Дірака описуються введенням деякого ефективного калібрувального поля, аналогічного електромагнітному вектору-потенціалу [8]. Зокрема, точковий дефект еквівалентний введенню ПАБ, центр симетрії якого збігається з розташуванням дефекту. Тому отримані розв'язки можуть бути використані для визначення особливостей поведінки електронних збуджень графена в присутності постійного магнітного поля поблизу дефекту.

Зауважимо, що оскільки розв'язки були одержані в рамках ідеалізованої задачі, виникає питання про ефективність їх використання в конкретних ситуаціях. Сьогодні створення електронної двовимірної системи з магнітним вихором не є складним [9, 10], тому питання застосовності розв'язків може бути вирішене експериментально.

1. *Gusynin V. P., Sharapov S. G., Carbotte J. P.* AC conductivity of graphene: from tight-binding model to 2+1-dimensional quantum electrodynamics // Int. J. Mod. Phys. B. – 2007. – **21**, No 27. – P. 4611–4658.
2. *Sitenko Yu. A.* Self-adjointness of the Dirac Hamiltonian and fermion number fractionization in the background of a singular magnetic vortex // Phys. Lett. B. – 1996. – **387**, No 2. – P. 334–340.
3. *Hagen C. R.* Aharonov–Bohm scattering of particles with spin // Phys. Rev. Lett. – 1990. – **64**, No 5. – P. 503–506.
4. *Никифоров А. Ф., Уваров В. Б.* Специальные функции математической физики. – Москва: Наука, 1978. – 350 с.
5. *Melrose D. B., Parle A. J.* Quantum electrodynamics in strong magnetic fields. I. Electron states // Aust. J. Phys. – 1983. – **36**, No 6. – P. 755–774.
6. *Slobodeniuk A. O., Sharapov S. G., Loktev V. M.* Aharonov–Bohm effect in relativistic and nonrelativistic two-dimensional electron gases: a comparative study // Phys. Rev. B. – 2010. – **82**, No 7. – P. 075316–1–075316–11.
7. *Desbois J., Ouvry S., Texier C.* Hall conductivity for two-dimensional magnetic systems // Nucl. Phys. B. – 1997. – **500**, No 1–3. – P. 486–510.
8. *Cortijo A., Vozmediano M. A. H.* Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene // Ibid. – 2007. – **763**, No 3. – P. 293–308.
9. *Geim A. K., Bending S. J., Grigorieva I. V.* Assymmetric scattering and diffraction of two-dimensional electrons at quantized tubes of magnetic flux // Phys. Rev. Lett. – 1992. – **69**, No 15. – P. 2252–2255.
10. *Bending S. J., von Klitzing K., Ploog K.* Weak localization in a distribution of magnetic flux tubes // Ibid. – 1990. – **65**, No 8. – P. 1060–1063.

Інститут теоретичної фізики
ім. М. М. Боголюбова НАН України, Київ

Надійшло до редакції 12.11.2010

A. O. Slobodeniuk

Solutions of the Dirac equation in an inhomogeneous magnetic field

We study the influence of inhomogeneities of a magnetic field on the dynamics of electronic excitations in graphene. Graphene in constant magnetic and Aharonov–Bohm's fields is considered. We found the eigenfunctions and the spectrum of the corresponding system's Hamiltonian. The obtained solutions are compared with the solutions at a constant magnetic field.