

A Dirac-Kepler probléma az általánosított Dirac egyenletben

Gulácsi Balázs Fizika BSc

Konzulens: Dr. Dóra Balázs

2012. október

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	3
1.1. Grafén	4
1.2. Dice lattice	5
2. A Dirac-Kepler probléma az $S = \frac{1}{2}$ esetben	8
2.1. J_z sajátfüggvényei	8
2.2. A radiális egyenletek	9
2.3. A kapott differenciálegyenlet megoldása szubkritikus esetben	11
2.3.1. $\phi_j^A(r)$ és $\phi_j^B(r)$ függvények aránya	12
2.4. A radiális egyenletrendszer teljes megoldása a szubkritikus esetben	12
2.4.1. A normálási konstans meghatározása	14
2.5. Lokális állapotsűrűség	15
3. A Dirac-Kepler probléma az $S = 1$ esetben	18
3.1. J_z sajátfüggvényei	18
3.2. A radiális egyenletrendszer	19
3.3. A $\phi_j^H(\rho)$ differenciálegyenletének megoldása	22
3.4. A normálási tényező meghatározása	24
3.4.1. A probléma aszimptotikus megoldása	24
3.5. Lokális állapotsűrűség	27
4. Összefoglalás	30
A. Matematikai függelék	32
A.1. H és J_z felcserélési relációja	32
A.2. A Coulomb függvények integrálja	33
A.3. A (75)-ös egyenletrendszer részleges diagonalizálása	33

1. Bevezetés

A grafén századunk talán legnagyobb érdeklődéssel övezet anyaga. Elméleti leírása már az 1940-es években megtörtént, viszont egészen 2004-es előállításáig nem is lehettünk biztosak abban, hogy egyáltalán ilyen anyag önállóan létezhet.[1][2] A grafén rendkívüli mechanikus és elektromos tulajdonságai miatt nagyon sokrétegű felhasználási lehetőségeket biztosít, emellett fontos elméleti érdekességeket is magában rejteget, ami szintén növeli iránta az érdeklődést.[5] Egy ilyen elméleti érdekesség az, hogy a grafén vezetési elektronjai kezelhetőek, mint zérus nyugalmi tömegű Dirac fermionok. Felmerül a kérdés, hogy vajon léteznek-e további rácsszerkezetek, melyek hasonló tulajdonságokkal bírnak. Erre a kérdésre reagálva témavezetőm és társai bemutattak olyan szerkezeteket, melyek rendelkeznek az előbbi tulajdonsággal.[3] Egy ilyen rácsszerkezetet fogok vizsgálni abból a szempontból, hogy milyen hatással van a rendszerbe kerülő töltéssel rendelkező szennyeződés a rendszer fizikai tulajdonságaira. Ez azért fontos, mert a grafénhoz hasonló anyagok előállításakor szennyeződések kerülhetnek a rácsszerkezeteikbe, amelyek befolyásolják a fizikai tulajdonságaikat. A szennyeződés jelenlétét, mint látni fogjuk, egy Dirac jellegű egyenletbe kerülő Coulomb potenciállal lehet figyelembe venni, aminek matematikai alakja miatt szokás ezt a problémát Dirac-Kepler problémának nevezni.

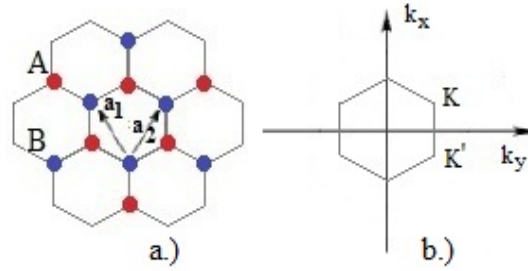
A Dirac-Kepler probléma egy elméleti érdekessége, hogy nem enged meg kötött állapotokat, ellentétben a Schrödinger-Kepler problémával (H-atom). Ennek oka a diszperziós relációkkal magyarázható. A Schrödinger egyenlet ugyanis olyan részecskéket ír le, amelyeknek szabad esetben nincsenek negatív energiájú állapotai, ezért kialakulhat a vonzó (negatív) Coulomb potenciálvölgyben kötött állapot. A Dirac egyenlet azonban olyan diszperziós relációjú részecskéket ír le, amelyeknek a negatív energiás állapotai is töltöttek, ezért, például ahogy látni fogjuk a grafén Dirac egyenlettel való leírása nem enged meg kötött állapotú megoldásokat.

A grafén esetében a töltött szennyező hatásának vizsgálata már megtörtént.[4][17] Az általam vizsgált $\mathcal{T}_3$ elnevezésű rács esetében, viszont még nem. A dolgozat elején megemlítem a grafén és a vizsgálni kívánt $\mathcal{T}_3$ rács néhány tulajdonságát és ezek következményeit, majd megvizsgálom milyen hatással van a rendszerbe kerülő töltéssel rendelkező szennyeződés a

fizikai tulajdonságokra. A számolásoknál mindenhol $\hbar = 1$ egységet használtam.

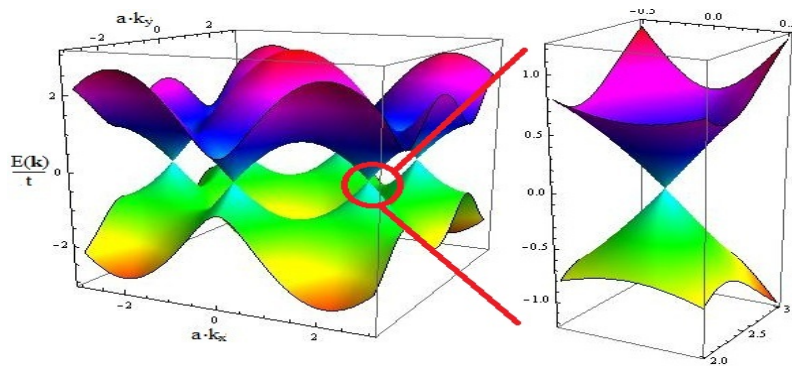
1.1. Grafén

A grafén egy kétdimenziós anyag, melynek atomjai hatszögrácsba rendeződnek. A szerkezet Bravais rácsa egy háromszögrács, elemi cellájában pedig két atom (A és B) helyezkedik el. A reciprok rács szintén háromszögrács, amelynek Wigner-Seitz cellája egy hatszög.



1. ábra. A grafén szerkezete: (a) Rácsszerkezet (b) Az első Brillouin zóna

A rács elektronjainak diszperziós relációját szoros kötésű közelítéssel számolva és csak az első szomszéd átfedési integrálokat figyelembe véve, ami grafén esetén: $t = 2,7eV$, arra az érdekességre bukkanunk, hogy a Brillouin zóna sarkainál (K és K') a diszperziós reláció lineáris.[5]



2. ábra. A grafén diszperziós relációja

A lineáris résznél a diszperziós reláció: $E(\mathbf{k}) = \pm \frac{3at}{2} |\mathbf{k}| = \pm \frac{\nu_F}{2} |\mathbf{k}|$. Hasonló diszperziós relációja van a nyugalmi tömeggel nem rendelkező relativisztikus részecskének. Ezt az

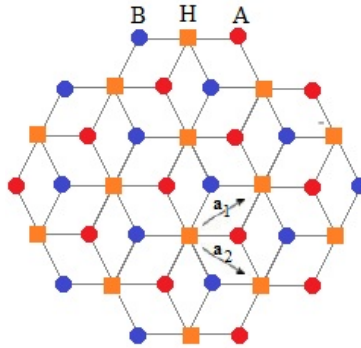
analógiát felhasználva a grafén K és K' pontok körüli elektronjait egy kétdimenziós Dirac jellegű egyenlettel írhatjuk le, melynek Hamilton operátora:

$$H = \nu_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p}. \quad (1)$$

Az egyenletben a fénysebesség szerepét átveszi a $\nu_F \approx 10^6 \frac{m}{s}$ Fermi sebesség. Ebben az esetben a pszeudo-spin változó $S = \frac{1}{2}$, amelyet a 2×2 -es, $\frac{1}{2}$ -del lenormált Pauli mátrixok reprezentálnak. A $\mathbf{p} = (p_x, p_y, 0)$ az impulzus operátor. Az (1)-ben szereplő Hamilton operátor egy kétkomponensű spinorra hat, amelynek komponensei az egyes alrácok hullámfüggvényei.

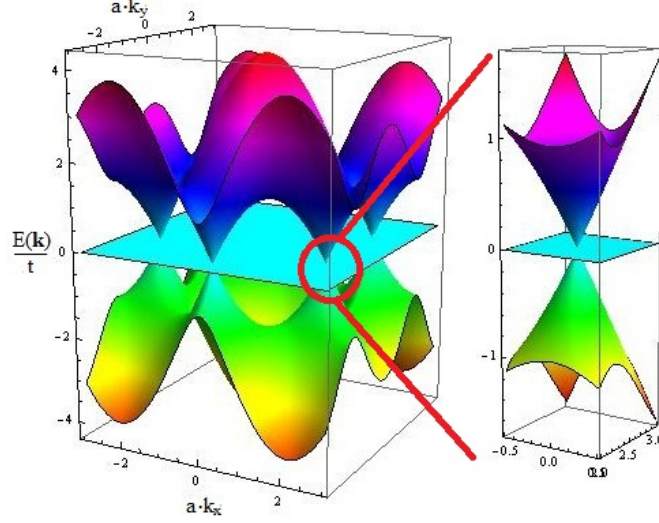
1.2. Dice lattice

A dice-lattice vagy más néven $\mathcal{T}_3$ rács, szintén egy kétdimenziós rácsszerkezet. Bravais rácsa egy háromszögrács, de elemi cellájában 3 atom található (A, H és B). Ennek a rácsnak a reciprokrácsa az úgynevezett Kagome rács, amelynek Wigner-Seitz cellája egy hatszög. Így a dice-lattice első Brillouin zónája megegyezik a grafénével.



3. ábra. A $\mathcal{T}_3$ rács szerkezete

Ennek a rácsszerkezetnek egy érdekessége, hogy az elektronok diszperziós relációját szoros kötésű közelítéssel számolva megjelenik egy diszperzió nélküli sáv.[6]



4. ábra. A $\mathcal{T}_3$ rács diszperziós relációja

Ebben az esetben K pont körül a diszperziós reláció: $E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm 3at|\mathbf{k}| = \pm \nu_F|\mathbf{k}|$ és $E_0(\mathbf{k}) = 0$. Ezen elektronokat az (1)-es Hamilton operátorral írhatjuk le, csak a pseudo-spin változó $S = 1$ -re változik.[3] Az ezt reprezentáló mátrixok:

$$S_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Megjegyzem, hogy ez a Hamilton operátor már egy három komponensű spinorra hat, amelynek komponensei a három alrác hullámfüggvényei.

Ezt a tudást felhasználva a grafén és $\mathcal{T}_3$ rácsszerkezetekbe kerülő töltéssel rendelkező szennyeződés jelenlétét, úgy lehet figyelembe venni, hogy az (1)-es Hamilton operátorba bekerül egy Coulomb potenciál.

A dolgozat következő fejezetében a Dirac-Kepler problémát vizsgálom meg pseudo-spin $S = \frac{1}{2}$ esetre, ami analóg a grafén szerkezetbe kerülő töltéssel rendelkező szennyeződés jelenlétével. Ebben a fejezetben az [4]-ben publikált eredmények részletes levezetését mutatom be, ami a munkatechnika elsajátítását eredményezte. Ezen részletes levezetés elvégzése, a 4 oldalas [4]-re alapozva, az én munkám eredménye. A következő fejezetben, pedig ezzel az elsajátított technikával vizsgálom a Dirac-Kepler problémát a pseudo-spin $S = 1$ esetre. Ez a fejezet, teljes egészében a saját munkám eredménye. Mindkettő esetben a szubkritikus

eseten van a hangsúly. A dolgozat végén egy rövid összefoglaló található az elért eredményekről, végül a referenciák után a függelék következik, amely a matematikai részletek foglalja magában és zárja le a munkát.

2. A Dirac-Kepler probléma az $S = \frac{1}{2}$ esetben

A tanulmányozandó egyenlet:

$$H\Psi = (\nu_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + V)\Psi = E\Psi, \quad V = V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \cdot \frac{1}{r}. \quad (3)$$

Mivel a potenciál radiális, ezért áttérek henger koordinátákra: $(x, y, z) \rightarrow (r, \varphi, z)$. Ebben az esetben a Hamilton operátor alakja (a potenciál nélkül):

$$\nu_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} = \frac{\nu_F}{2} \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y \\ p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = \frac{\nu_F}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) \\ e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Klasszikus fizikában két dimenziós mozgás esetén a síkra merőleges impulzusmomentum komponens mozgásállandó. Az könnyen belátható, hogy ez ebben az esetben is így van. Az (3)-as Hamilton operátor és a teljes impulzusmomentum z-komponensének felcserélési relációjára igaz, hogy (lsd. A.1.):

$$[H, J_z] = [H, L_z] + [H, S_z] = 0. \quad (5)$$

A felcserélés következménye, hogy az operátorok sajátfüggvényei megegyeznek. Így elég J_z sajátfüggvényeit nézni.

2.1. J_z sajátfüggvényei

Hengerkoordináták esetén és $\hbar = 1$ egységekben:

$$J_z = L_z + S_z = \begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Mivel J_z egy 2×2 -es mátrixszal adott, ennek megfelelően a hozzá tartozó sajátvektorok kétkomponensű vektorok, amelyek alakja:

$$\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} X_1(r, \varphi) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} X_2(r, \varphi) = \begin{pmatrix} X_1(r, \varphi) \\ X_2(r, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

A sajátértékegyenletben a J_z csak a φ változóra hat, ezért $X_{1,2}(r, \varphi)$ -t szorzatalakba írva, a kapott differenciálegyenletek szeparálhatóak, megoldásuk:

$$J_z \Psi = j\Psi \rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} A_1(r)e^{i(j-\frac{1}{2})\varphi} \\ A_2(r)e^{i(j+\frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Felhasználva, hogy a hullámfüggvények szögfüggése periódikus kell legyen, azaz $\Psi(r, \varphi) = \Psi(r, \varphi + 2\pi)$ a j értéke csak félegész értékeket vehet fel:

$$j = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, \dots \quad (9)$$

Megjegyzem, hogy minden j értékhez két hullámfüggvény tartozik, így minden j sajátérték kétszeresen degenerált a (8) egyenletben.

2.2. A radiális egyenletek

Következő lépésként a (8)-ban adott Ψ hullámfüggvényt kell behelyettesíteni a (3)-as egyenletbe. A potenciál kifejezésében egyszerűsítésként bevezettem a következőket:

$$g \equiv \frac{Ze^2}{2\pi\epsilon_0\epsilon_r\nu_F}, \quad \epsilon = \frac{2E}{\nu_F}. \quad (10)$$

Így a megoldandó egyenlet, a bal oldalra átrendezve:

$$\begin{pmatrix} -(\epsilon + \frac{g}{r}) & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) \\ e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_1(r)e^{i(j-\frac{1}{2})\varphi} \\ A_2(r)e^{i(j+\frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix} = 0. \quad (11)$$

Ebben elvégezve a φ változóra ható operációkat a következő egyenlet adódik:

$$\begin{pmatrix} -(\epsilon + \frac{g}{r}) & -i\left(\frac{1}{r}(j + \frac{1}{2}) + \frac{\partial}{\partial r}\right) \\ i\left(\frac{1}{r}(j - \frac{1}{2}) - \frac{\partial}{\partial r}\right) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(r) \\ A_2(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (12)$$

A mátrix offdiagonálisában lévő i képzetes egységtől és $\frac{1}{2r}$ -es tagoktól megszabadulhatunk, ha a spinort a következő alakban vesszük:

$$\Psi = \psi_{j,\epsilon}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r)e^{i(j-\frac{1}{2})\varphi} \\ i\phi_j^B(r)e^{i(j+\frac{1}{2})\varphi} \end{pmatrix}. \quad (13)$$

Az így megmaradt differenciálegyenlet rendszer:

$$\begin{pmatrix} (\epsilon + \frac{g}{r}) & -(\frac{j}{r} + \frac{\partial}{\partial r}) \\ (-\frac{j}{r} + \frac{\partial}{\partial r}) & (\epsilon + \frac{g}{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (14)$$

A megoldás következő lépése a (14)-es egyenlet diagonalizálása. Ehhez először az első egyenletből kifejezzük a $\phi_j^A(r)$ tagot:

$$\phi_j^A(r) = \frac{\frac{j}{r}\phi_j^B(r) + \frac{\partial}{\partial r}\phi_j^B(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}}. \quad (15)$$

Ezt behelyettesítve (14) második egyenletébe a $\phi_j^B(r)$ -re kapott egyenlet:

$$\begin{aligned} \frac{-\frac{j^2}{r^2}\phi_j^B(r) - \frac{j}{r}\frac{\partial}{\partial r}\phi_j^B(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \frac{\left(-\frac{j}{r^2}\phi_j^B(r) + \frac{j}{r}\frac{\partial}{\partial r}\phi_j^B(r) + \frac{\partial^2}{\partial r^2}\phi_j^B(r)\right)\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)}{\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2} + \\ + \frac{\frac{g}{r^2}\left(\frac{j}{r}\phi_j^B(r) + \frac{\partial}{\partial r}\phi_j^B(r)\right)}{\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2} + \left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)\phi_j^B(r) = 0. \end{aligned}$$

Ezt rendezve azt kapjuk:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\phi_j^B(r) + \left[\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j+1)}{r^2}\right]\phi_j^B(r) + \frac{g}{r^2}\frac{\left(\frac{j}{r}\phi_j^B(r) + \frac{\partial}{\partial r}\phi_j^B(r)\right)}{\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)} = 0. \quad (16)$$

Látható, hogy (16) utolsó kifejezése pontosan a (15)-ös kifejezést adja vissza, így végül az egyenlet alakja:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\phi_j^B(r) + \left[\left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j+1)}{r^2}\right]\phi_j^B(r) + \frac{g}{r^2}\phi_j^A(r) = 0. \quad (17)$$

Teljesen hasonlóan visszatérve (14)-hez a második egyenletből kifejezhető $\phi_j^B(r)$, ami behelyettesíthető az első egyenletbe, majd az előzőekben leírtakat végigcsinálva egy részleges diagonalizáláshoz jutunk:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j-1)}{r^2} & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{r^2} & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j+1)}{r^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (18)$$

Következő lépésként a (18)-as egyenletrendszer mátrixát átírjuk

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j-1)}{r^2} + \Lambda - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{r^2} & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon + \frac{g}{r}\right)^2 - \frac{j(j+1)}{r^2} + \Lambda - \Lambda \end{pmatrix} = \\ = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon^2 + 2\frac{g\epsilon}{r} - \frac{j^2-g^2}{r^2}\right) + \Lambda & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon^2 + 2\frac{g\epsilon}{r} - \frac{j^2-g^2}{r^2}\right) + \Lambda \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{j}{r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{r^2} & -\frac{j}{r^2} - \Lambda \end{pmatrix}. \quad (19)$$

alakba. A Λ értékét úgy kell választani, hogy a (19)-es második mátrix hatása az állapotvektorra zérust adjon, de mindezt nem azonosan nulla $\phi_j^A(r)$ és $\phi_j^B(r)$ esetére. Ezt csak úgy lehet, ha ennek a mátrixnak a determinánsa zérus.

$$\begin{vmatrix} \frac{j}{r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{r^2} & -\frac{j}{r^2} - \Lambda \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \Lambda = \pm \frac{\sqrt{j^2 - g^2}}{r^2}. \quad (20)$$

Ennek alapján a diagonalizált egyenlet:

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon^2 + 2\frac{g\epsilon}{r} - \frac{j^2 - g^2}{r^2}\right) \pm \frac{\sqrt{j^2 - g^2}}{r^2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\epsilon^2 + 2\frac{g\epsilon}{r} - \frac{j^2 - g^2}{r^2}\right) \pm \frac{\sqrt{j^2 - g^2}}{r^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0.$$

Bevezetve a következő jelöléseket a megoldandó differenciálegyenlet:

$$\alpha = \sqrt{j^2 - g^2}, \quad \lambda = \pm 1,$$

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} f_\lambda(r) + \left(\epsilon^2 + 2\frac{g\epsilon}{r} - \frac{\alpha(\alpha - \lambda)}{r^2}\right) f_\lambda(r) = 0. \quad (21)$$

Ezt az egyenletet elosztva $|\epsilon|^2$ -tel és bevezetve a $\tilde{g} = g \cdot \text{sign}(\epsilon)$ új állandót és a $\rho = |\epsilon|r$ új független változót. A megoldandó egyenlet

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} f_\lambda(\rho) + \left(1 + 2\frac{\tilde{g}}{\rho} - \frac{\alpha(\alpha - \lambda)}{\rho^2}\right) f_\lambda(\rho) = 0. \quad (22)$$

2.3. A kapott differenciálegyenlet megoldása szubkritikus esetben

A (22)-es egyenlet pontosan a jól ismert Coulomb probléma differenciálegyenlete[8]

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} F + \left(1 - 2\frac{\eta}{\rho} - \frac{L(L+1)}{\rho^2}\right) F = 0,$$

amelynek reguláris megoldása: $F_L(\eta, \rho)$, amelyről tudni lehet, hogy teljesen valós.[9] Ezt összehasonlítva a (22)-es egyenlettel látható, hogy $\lambda = 1$ esetre:

$$\eta = -\tilde{g}, \quad L = \alpha - 1 \quad \text{vagy} \quad L = -\alpha, \quad (23)$$

továbbá $\lambda = -1$ esetre:

$$\eta = -\tilde{g}, \quad L = \alpha \quad \text{vagy} \quad L = -\alpha - 1. \quad (24)$$

Figyelembe véve, hogy $\alpha = \sqrt{j^2 - g^2}$ bizonyos j kvantumszámokra, ha $g > g_c = \frac{1}{2}$, α tisztán képzetes lesz. Ennek az a következménye, hogy ha a rácsszerkezetbe kerülő szennyeződés nagyságát jellemző g érték a kritikus g_c értéke felett van (22) megoldásai megváltoznak, ami további következménye, hogy a megoldásokból számolt fizikai tulajdonságok is változnak.

E dolgozatban a hangsúly a szubkritikus eseten van, amikor is $g < g_c$. Ekkor felhasználva, hogy $F_L(\eta, \rho \rightarrow 0) \sim \rho^{L+1}$ a negatív indexű tagok divergensek lennének, ha $\alpha \in \mathbb{R}$. Ebből

az következik, hogy (22) megoldásait a szubkritikus esetben az $F_\alpha(-\tilde{g}, \rho)$ és $F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho)$ Coulomb hullámfüggvények lineáris komboniációi adják.

Fontos hangsúlyozni még, hogy a (21)-es egyenletben jelenlévő ϵ^2 -es tag miatt ez a modell nem adhat kötött állapotokat. Hiszen a (21)-es egyenletnek $r \rightarrow \infty$ esetben, az energia előjelétől függetlenül, trigonometrikus megoldásai lesznek, amelyek propagáló állapotokat írnak le. Így az energia spektruma folytonos.

2.3.1. $\phi_j^A(r)$ és $\phi_j^B(r)$ függvények aránya

A diagonalizálás eredményeképpen a radiális spinor komponensei a (22)-es differenciálegyenletet teljesítik. Egy másodrendű differenciálegyenletnek két lineárisan független megoldása van. Mivel a divergens tagokat, azaz a lineárisan független megoldások közül az egyiket, már elhagytam, ezért ebből az kell következzen, hogy a spinor komponensei arányosak. Érdekes módon ezt az arányosságot a (19)-es egyenlet második mátrixa rögzíti a

$$\begin{pmatrix} \frac{j}{r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{r^2} & -\frac{j}{r^2} - \Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (25)$$

egyenletrendszerben, ahol, amint már (20)-ban láttuk $\Lambda = \pm \frac{\alpha}{r^2} = \lambda \frac{\alpha}{r^2}$. Ha $\lambda = +1$, amihez az $F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho)$ megoldás tartozik, akkor (25)-ből kifejezhető a két függvény aránya:

$$\frac{\phi_j^B(r)}{\phi_j^A(r)} = \frac{j - \alpha}{g} = \frac{j - \alpha}{s_g \sqrt{j^2 - \alpha^2}} = s_g \frac{\sqrt{j - \alpha}}{\sqrt{j + \alpha}} = s_{gj} \frac{\sqrt{|j - \alpha|}}{\sqrt{|j + \alpha|}}. \quad (26)$$

Itt $s_x \equiv \text{sign}(x)$. Mivel a szubkritikus esetben $\alpha \in \mathbb{R}$ és $|j| > |\alpha|$, ezért $j \pm \alpha = s_j |j \pm \alpha|$.

Hasonlóan, ha $\lambda = -1$, amihez az $F_\alpha(-\tilde{g}, \rho)$ megoldás tartozik, a két függvény aránya:

$$\frac{\phi_j^B(r)}{\phi_j^A(r)} = \frac{j + \alpha}{g} = \frac{j + \alpha}{s_g \sqrt{j^2 - \alpha^2}} = s_g \frac{\sqrt{j + \alpha}}{\sqrt{j - \alpha}} = s_{gj} \frac{\sqrt{|j + \alpha|}}{\sqrt{|j - \alpha|}}. \quad (27)$$

2.4. A radiális egyenletrendszer teljes megoldása a szubkritikus esetben

A teljes megoldást a következő alakban kell keresni:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{a_+^2 + b_+^2}} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix} F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho) + \frac{1}{\sqrt{a_-^2 + b_-^2}} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix} F_\alpha(-\tilde{g}, \rho). \quad (28)$$

Ebben N_j egy normálási tényező, amit majd később számolok ki. Jelen esetben az egyre normált oszlopvektorok komponenseit határozom meg. Bevezetve az $u_{\pm}$ jelölést az egyre normált oszlopvektorokra:

$$u_+ = \frac{1}{\sqrt{a_+^2 + b_+^2}} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \end{pmatrix}, \quad u_- = \frac{1}{\sqrt{a_-^2 + b_-^2}} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \end{pmatrix}. \quad (29)$$

ekkor (28) a következő alakra írható:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = u_+ F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho) + u_- F_{\alpha}(-\tilde{g}, \rho). \quad (30)$$

Tételezzük fel, hogy csak az $F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho)$ megoldás van jelen, ekkor b_+ és a_+ aránya pontosan a (26)-ban kiszámolt arányt kell adja, amiből

$$b_+ = s_{gj} \sqrt{|j - \alpha|}, \quad a_+ = \sqrt{|j + \alpha|} \quad (31)$$

következik, amelynek normálása: $\sqrt{a_+^2 + b_+^2} = \sqrt{|j - \alpha| + |j + \alpha|} = \sqrt{2|j|}$. Következőnek tételezzük fel, hogy csak az $F_{\alpha}(-\tilde{g}, \rho)$ megoldás van jelen, ekkor b_- és a_- aránya (27)-et kell visszaadja, amiből

$$b_- = s_{gj} \sqrt{|j + \alpha|}, \quad a_- = \sqrt{|j - \alpha|} \quad (32)$$

következik és normálása az előbbivel egyezik meg. Ebből az egyre normált oszlopvektorok alakja:

$$u_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{|2j|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|j \pm \alpha|} \\ s_{gj} \sqrt{|j \mp \alpha|} \end{pmatrix}. \quad (33)$$

Ezek után a (14)-es egyenletrendszer teljes megoldása:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{|2j|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|j + \alpha|} \\ s_{gj} \sqrt{|j - \alpha|} \end{pmatrix} F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho) + \frac{1}{\sqrt{|2j|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|j - \alpha|} \\ s_{gj} \sqrt{|j + \alpha|} \end{pmatrix} F_{\alpha}(-\tilde{g}, \rho). \quad (34)$$

Megjegyzem (34) a (14)-es egyenletrendszernek egy rögzített $+\epsilon$ energián vett megoldása. Negatív $-\epsilon$ energiához tartozó megoldás (34)-re ortogonális kell legyen, hiszen két különböző sajátértékhez tartozó sajátvektor ortogonális. Ennek az a következménye, hogy (34)-ben

megjelenik még egy kifejezés ami az energia előjelétől függ. Megfigyelhető az is, hogy a (22)-es differenciálegyenletbe az egyetlen hely ahol ϵ belép ott g -vel szorzódik, így g előjelváltása ugyanazt a hatást éri el, a differenciálegyenlet megoldása szempontjából, mint ϵ előjelváltása. Ennek megfelelően a végső megoldás:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{|2j|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|j+\alpha|} \\ s_{gj}\sqrt{|j-\alpha|} \end{pmatrix} F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, \rho) + \frac{s_{g\epsilon}}{\sqrt{|2j|}} \begin{pmatrix} \sqrt{|j-\alpha|} \\ s_{gj}\sqrt{|j+\alpha|} \end{pmatrix} F_{\alpha}(-\tilde{g}, \rho). \quad (35)$$

2.4.1. A normálási konstans meghatározása

A normálási feltétel (13) alapján és az energiaspektrum folytonossága miatt a következőképpen írható:

$$\int \psi_{i,\epsilon}(r, \varphi)^\dagger \psi_{j,\epsilon'}(r, \varphi) \, \mathbf{dr} = \delta_{ij} \delta(\epsilon - \epsilon'). \quad (36)$$

Ezt $i = j$ és $\epsilon' \rightarrow \epsilon$ esetben szimbolikusan úgy írhatjuk, hogy

$$\int |\psi_{j,\epsilon}(r, \varphi)|^2 \, \mathbf{dr} = \delta(0), \quad (37)$$

amelyből

$$\int_0^\infty \int_0^{2\pi} |X_1(r, \varphi)|^2 + |X_2(r, \varphi)|^2 \, r \, dr \, d\varphi = \delta(0). \quad (38)$$

Elvégezve a φ szerinti integrálást és behelyettesítve a radiális részeket, azt kapjuk, hogy

$$\int_0^\infty |\phi_j^A(r)|^2 + |\phi_j^B(r)|^2 \, dr = \frac{1}{2\pi} \delta(0), \quad (39)$$

végül (35) felhasználásával az elvégzendő integrál:

$$N_j^2 \int_0^\infty F_{\alpha-1}^2(-\tilde{g}, |\epsilon|r) + F_{\alpha}^2(-\tilde{g}, |\epsilon|r) + 2 \frac{\tilde{g}}{|j|} F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, |\epsilon|r) F_{\alpha}(-\tilde{g}, |\epsilon|r) \, dr = \frac{1}{2\pi} \delta(0). \quad (40)$$

Ez az integrál elvégezhető, az alábbi formula segítségével (lsd. A.2.):

$$\begin{aligned} \int_0^\infty F_{L_1}(\eta, \xi z) F_{L_2}(\eta, \xi' z) \, dz &= \cos(\Theta_{L_1} - \Theta_{L_2}) \frac{\pi}{2} \delta(\xi - \xi'), \\ \Theta_L &= \arg \Gamma(L + 1 + i\eta) - \frac{L\pi}{2}. \end{aligned} \quad (41)$$

Amiből a normálási konstans: $N_j^2 = \frac{j^2}{2\pi^2 \alpha^2}$.

A (35)-ös összefüggés és N_j ismerete azt jelenti, hogy szubkritikus és $S = \frac{1}{2}$ esetre a Dirac-Kepler problémát megoldottam. (10) alapján kiszámolható, hogy a kritikus g_c értékhez $Z_c \approx 0.5 \cdot \varepsilon_r$ rendszám tartozik. Például, ha a grafénréteg SiO_2 közegben van, akkor $Z_c \approx 1$, de más közegben létrehozva, ez a kritikus Z érték növelhető[7]: Ammónia esetén: $Z_c \approx 12$, víz esetén: $Z_c \approx 40$. Így a szubkritikus eset tanulmányozása is indokolt.

2.5. Lokális állapotsűrűség

A lokális állapotsűrűség azt mutatja meg, hogy egy $\mathbf{r}$ pontban mennyi az E körüli dE intervallumban a lehetséges elektron állapotok száma. Képlettel kifejezve:

$$N(\epsilon, r) = \sum_E |\Psi_E|^2 \delta(\epsilon - E). \quad (42)$$

Ahol Ψ_E a (3)-as sajátértékegyenlethez tartozó sajátvektor egy rögzített E sajátérték esetén. $|\Psi_E|^2$ megtalálási valószínűség sűrűség felírható, mint

$$|\Psi_E|^2 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\psi_{j,E}|^2, \quad (43)$$

hiszen a Ψ_E megoldás ortogonális és különböző j -hez tartozó $\psi_{j,E}$ járulékokból épülnek fel. Az összegzés természetesen feles j -kre értendő, ahogy azt (9) is mutatja. Behelyettesítve (42)-be és elvégezve az összegzést E -re, ami folytonossága miatt integrálássá alakul, a lokális állapotsűrűség kifejezése

$$N(\epsilon, r) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\psi_{j,\epsilon}|^2 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{1}{r} (|\phi_j^A(r)|^2 + |\phi_j^B(r)|^2). \quad (44)$$

Felhasználva (40)-et

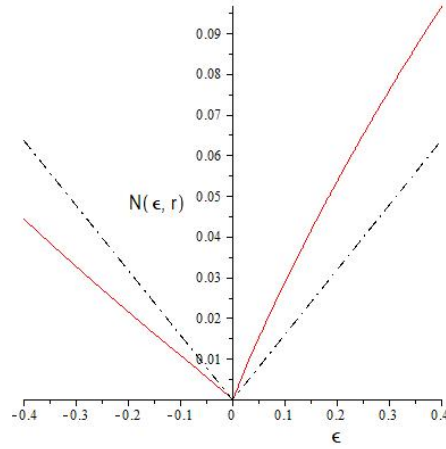
$$N(\epsilon, r) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{N_j^2}{r} \left(F_{\alpha-1}^2(-\tilde{g}, |\epsilon|r) + F_{\alpha}^2(-\tilde{g}, |\epsilon|r) + 2 \frac{S_{\epsilon} g}{|j|} F_{\alpha-1}(-\tilde{g}, |\epsilon|r) F_{\alpha}(-\tilde{g}, |\epsilon|r) \right). \quad (45)$$

Ha $g \rightarrow 0$, akkor a Coulomb függvények Bessel függvényekké alakulnak[10] figyelembe véve (9)-et is visszkapjuk a tiszta grafénrács állapotsűrűségét:

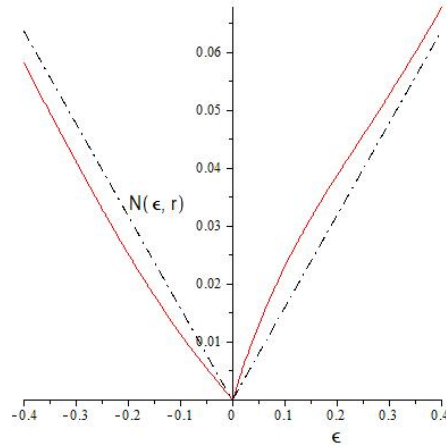
$$\begin{aligned} N_{\text{tisza}}(\epsilon, r) &= \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{N_j^2}{r} \frac{\pi}{2} |\epsilon| r \left(J_{|j|-\frac{1}{2}}^2(|\epsilon|r) + J_{|j|+\frac{1}{2}}^2(|\epsilon|r) \right) = \\ &= \frac{|\epsilon|}{2\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \left(J_k^2(|\epsilon|r) + J_{k+1}^2(|\epsilon|r) \right) = \frac{|\epsilon|}{2\pi}. \end{aligned} \quad (46)$$

(46) második sorában az összegzés elvégezhető és pontosan 1-et ad eredményül[11].

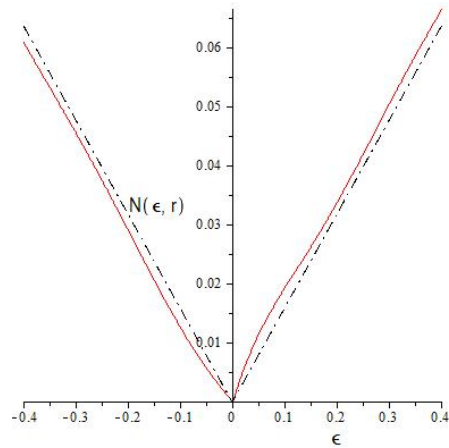
Összehasonlítva a tiszta és szennyezett grafén állapotsűrűségét azonnal látható, hogy az elektron-lyuk szimmetria elvész, hiszen (45)-ös képletben megjelenik az energia előjele. Ha $g > 0$, akkor a szennyező a negatív energiákon csökkenti, míg a pozitív energiákon növeli az állapotsűrűséget. Az is észrevehető, hogy r növelésével a szennyezett grafén állapotsűrűsége hasonlítani kezd a tiszta grafén állapotsűrűségéhez. Ez megnyugtató, hiszen az várható, hogy távolodva a szennyeződéstől, annak hatása csökken. Mindezeket a következő ábrákon szemléltetem (a képeken $g = \frac{1}{6}$ értéket választottam, fekete szaggatott-pontozott vonal a tiszta eset, míg a piros folytonos vonal a szennyezett eset):



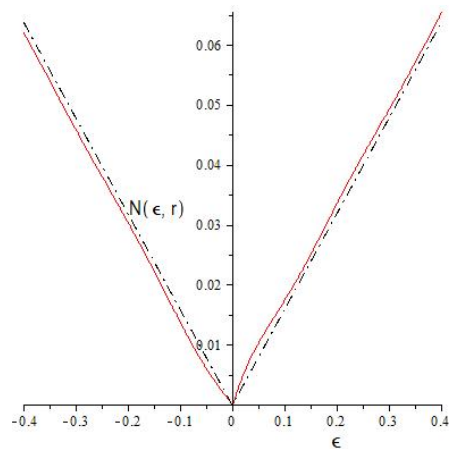
5. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 1$ esetben



6. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 5$ esetben



7. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 10$ esetben



8. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 15$ esetben

3. A Dirac-Kepler probléma az $S = 1$ esetben

A tanulmányozandó egyenlet:

$$H\Psi = (\nu_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} + V)\Psi = E\Psi, \quad V = V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} \cdot \frac{1}{r}. \quad (47)$$

A potenciált leválasztva a Hamilton operátor alakja henger koordinátákban (felhasználva (2)-öt)

$$\begin{aligned} v_F \mathbf{S} \cdot \mathbf{p} &= \frac{\nu_F}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & p_x - ip_y & 0 \\ p_x + ip_y & 0 & p_x - ip_y \\ 0 & p_x + ip_y & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\nu_F}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & 0 \\ e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & 0 & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) \\ 0 & e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (48)$$

alakú lesz. Az impulzusmomentum z komponensének operátora, ebben az esetben is felcserélhető a Hamilton operátorral (ld.(5)), ezért a sajátfüggvényeik megegyeznek.

3.1. J_z sajátfüggvényei

Az impulzusmomentum operátorának alakja ($\hbar = 1$):

$$J_z = L_z + S_z = \begin{pmatrix} -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + 1 & 0 & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} - 1 \end{pmatrix}. \quad (49)$$

A J_z egy 3×3 -es mátrixszal adott, ennek megfelelően a hozzá tartozó sajátvektorok háromkomponensű vektorok, amelyek alakja:

$$\Psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} X_1(r, \varphi) + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} X_2(r, \varphi) + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} X_3(r, \varphi) = \begin{pmatrix} X_1(r, \varphi) \\ X_2(r, \varphi) \\ X_3(r, \varphi) \end{pmatrix}. \quad (50)$$

Teljesen hasonlóan, mint az $S = \frac{1}{2}$ esetben J_z sajátértékegyenletében az operációk csak a φ változóra hatnak, ezért $X_{1,2,3}(r, \varphi)$ -t szorzatalakba írva, a kapott differenciálegyenletek

szeparálhatóak, megoldásuk:

$$J_z \Psi = j \Psi \rightarrow \Psi = \begin{pmatrix} A_1(r) e^{i(j-1)\varphi} \\ A_2(r) e^{ij\varphi} \\ A_3(r) e^{i(j+1)\varphi} \end{pmatrix}. \quad (51)$$

Felhasználva, hogy a hullámfüggvények szögfüggése periódikus kell legyen, azaz $\Psi(r, \varphi) = \Psi(r, \varphi + 2\pi)$ a j értéke csak egész értékeket vehet fel:

$$j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (52)$$

Megjegyzem, hogy minden j értékhez három hullámfüggvény tartozik, így minden j sajátérték háromszorosan degenerált az (51) egyenletben.

3.2. A radiális egyenletrendszer

Az (51)-ben adott Ψ sajátvektora a (47)-ben adott Hamilton operátorának, ezért behelyettesítve megkapjuk a radiális egyenleteket. Az egyszerűség kedvéért, most is bevezetek új állandókat:

$$g \equiv \frac{\sqrt{2} Z e^2}{4\pi \epsilon_0 \epsilon_r \nu_F}, \quad \epsilon = \frac{\sqrt{2} E}{\nu_F}. \quad (53)$$

Tehát a radiális egyenleteket megkapjuk, ha

$$\begin{pmatrix} -(\epsilon + \frac{g}{r}) & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & 0 \\ e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) & e^{-i\varphi}(-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) \\ 0 & e^{+i\varphi}(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi} - i\frac{\partial}{\partial r}) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(r) e^{i(j-1)\varphi} \\ A_2(r) e^{ij\varphi} \\ A_3(r) e^{i(j+1)\varphi} \end{pmatrix} = 0 \quad (54)$$

egyenletrendszerben elvégezzük a φ változóra ható operációkat. Ennek eredménye:

$$\begin{pmatrix} -(\epsilon + \frac{g}{r}) & -i(\frac{j}{r} + \frac{\partial}{\partial r}) & 0 \\ i(\frac{j-1}{r} - \frac{\partial}{\partial r}) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) & -i(\frac{j+1}{r} + \frac{\partial}{\partial r}) \\ 0 & i(\frac{j}{r} - \frac{\partial}{\partial r}) & -(\epsilon + \frac{g}{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1(r) \\ A_2(r) \\ A_3(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (55)$$

Az offdiagonálisban megjelenő imaginárius egységek eltüntethetők, ha a spinort hasonlóan választjuk meg, mint (13):

$$\Psi = \psi_{j,\epsilon}(r, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{r}} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) e^{i(j-1)\varphi} \\ i\phi_j^H(r) e^{ij\varphi} \\ \phi_j^B(r) e^{i(j+1)\varphi} \end{pmatrix}, \quad (56)$$

ekkor a megoldandó radiális egyenletrendszer végső alakja:

$$\begin{pmatrix} \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{-j+\frac{1}{2}}{r} - \frac{\partial}{\partial r} & 0 \\ \frac{-j+\frac{1}{2}}{r} + \frac{\partial}{\partial r} & \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{j+\frac{1}{2}}{r} + \frac{\partial}{\partial r} \\ 0 & \frac{j+\frac{1}{2}}{r} - \frac{\partial}{\partial r} & \epsilon + \frac{g}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (57)$$

A megoldást megkísérlem a (14)-es egyenlet diagonalizálásához hasonló technikával. Az első egyenletből ki lehet fejezni $\phi_j^A(r)$ -t:

$$\phi_j^A(r) = \frac{\frac{j-\frac{1}{2}}{r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}}. \quad (58)$$

Ezt behelyettesítve (57) második egyenletébe azt kaptam:

$$\begin{aligned} & \frac{-\frac{(j-\frac{1}{2})^2}{r^2} \phi_j^H(r) + \frac{-j+\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \frac{-\frac{j-\frac{1}{2}}{r^2} \phi_j^H(r) + \frac{j-\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \\ & + \frac{g}{r^2} \frac{\frac{j-\frac{1}{2}}{r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{(\epsilon + \frac{g}{r})^2} + (\epsilon + \frac{g}{r}) \phi_j^H(r) + \frac{j+\frac{1}{2}}{r} \phi_j^B(r) + \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^B(r) = 0, \end{aligned} \quad (59)$$

aminek harmadik tagjában felfedezhető az (58)-as képlettel adott $\phi_j^A(r)$. Következően (57) harmadik egyenletéből $\phi_j^B(r)$ -t fejeztem ki:

$$\phi_j^B(r) = \frac{-\frac{j+\frac{1}{2}}{r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}}. \quad (60)$$

Most ezt kell berakni (59)-be:

$$\begin{aligned} & \frac{g}{r^2} \frac{\phi_j^A(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \frac{-\frac{(j-\frac{1}{2})^2}{r^2} \phi_j^H(r) + \frac{-j+\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \frac{-\frac{j-\frac{1}{2}}{r^2} \phi_j^H(r) + \frac{j-\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \\ & + (\epsilon + \frac{g}{r}) \phi_j^H(r) + \frac{-\frac{(j+\frac{1}{2})^2}{r^2} \phi_j^H(r) + \frac{j+\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + \frac{\frac{j+\frac{1}{2}}{r^2} \phi_j^H(r) - \frac{j+\frac{1}{2}}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} + (61) \\ & + \frac{g}{r^2} \frac{-\frac{j+\frac{1}{2}}{r} \phi_j^H(r) + \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r)}{(\epsilon + \frac{g}{r})^2} = 0, \end{aligned}$$

aminek az utolsó tagjában megjelenik $\phi_j^B(r)$. Beszorozva (61)-et $(\epsilon + \frac{g}{r})$ -rel, az új egyenletrendszer:

$$\begin{pmatrix} \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{-j+\frac{1}{2}}{r} - \frac{\partial}{\partial r} & 0 \\ \frac{g}{r^2} & \hat{D}_r & \frac{g}{r^2} \\ 0 & \frac{j+\frac{1}{2}}{r} - \frac{\partial}{\partial r} & \epsilon + \frac{g}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = 0, \quad (62)$$

ahol $\hat{D}_r$ a (61)-ben a $\phi_j^H(r)$ -re ható differenciáloperátor. A (62)-es képletben észrevehető, hogy minden differenciálás a középső függvényre hat, ezért ebben az esetben nem lehet, olyan módon diagonalizálni az egyenletet, ahogy azt az $S = \frac{1}{2}$ esetben láttuk. Ezért az (57)-es egyenletrendszer megoldásához, ki kell fejezni a $\phi_j^H(r)$ differenciálegyenletét, majd annak a megoldásából a másik két függvényt meghatározhatjuk az (58) és (60)-as képlet segítségével.

Ez egyáltalán nem meglepő, hiszen ahogy a 3. ábrán is látszik, a középső H -val jelölt bázisatom kitüntetett szerepű, hiszen az köti össze a másik két bázisatomot. Megjegyzem a megnevezésük is ezt tükrözi, hiszen a H a "hub" (központi)-ra utal, A és B neve "rims" (keret).

A (61)-es egyenlet kibogozása után a következő egyenlet adódik $\phi_j^H(r)$ -ra:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r) + \frac{g}{r^2 \epsilon + r g} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \left(\frac{1}{2} \left(\epsilon + \frac{g}{r} \right)^2 - \frac{j^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - \frac{\frac{g}{2}}{r^3 \epsilon + r^2 g} \right) \phi_j^H(r) = 0.$$

Amit a törtek szétválasztásával egyszerűbb (átláthatóbb) alakra lehet hozni:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r) + \left(\frac{1}{r} - \frac{\epsilon}{r \epsilon + g} \right) \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \left(\frac{\epsilon^2}{2} + \frac{\epsilon g + \frac{\epsilon}{2g}}{r} + \frac{\frac{g^2}{2} - j^2 - \frac{1}{4}}{r^2} - \frac{\frac{\epsilon^2}{2g}}{r \epsilon + g} \right) \phi_j^H(r) = 0. \quad (63)$$

Azonnal szembetűnik, hogy ϵ^2 jelenléte miatt, most sem lehetnek kötött állapot megoldások, hasonló okokból, mint a grafénnál. Ez azt jelenti az energiaspektrum most is folytonos.

A diszperzió nélküli sáv miatt külön kell kezelni az $\epsilon = 0$ és az $\epsilon \neq 0$ esetet. Ha $\epsilon \neq 0$, akkor eloszthatom (63)-at ϵ^2 -tel, majd bevezetve az új $\rho = |\epsilon| r$ változót és $\tilde{g} = s_\epsilon g$ állandót, a megoldandó egyenlet végül a

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \phi_j^H(\rho) + \left(\frac{1}{\rho} - \frac{1}{\rho + \tilde{g}} \right) \frac{\partial}{\partial \rho} \phi_j^H(\rho) + \left(\frac{1}{2} + \frac{\tilde{g} + \frac{1}{2\tilde{g}}}{\rho} + \frac{\frac{\tilde{g}^2}{2} - j^2 - \frac{1}{4}}{\rho^2} - \frac{\frac{1}{2\tilde{g}}}{\rho + \tilde{g}} \right) \phi_j^H(\rho) = 0 \quad (64)$$

alakot ölti. Ha $\epsilon = 0$ akkor a (63)-as differenciálegyenlet egyszerű alakra redukálódik:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi_j^H(r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j^H(r) + \frac{\frac{g^2}{2} - j^2 - \frac{1}{4}}{r^2} \phi_j^H(r) = 0.$$

Ennek megoldásának

$$\phi_j^H(r) = C_1 r^{\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{g^2}{2}}} + C_2 r^{-\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{g^2}{2}}}$$

alakján látszik, hogy megjelenik egy kritikus g érték, ami alatt ez a megoldás nem kezelhető.

Ugyanis vagy az origóban, vagy pedig a végtelenben divergál, ezért $C_1 = C_2 = 0$.

Kritikus g fölött azonban jól viselkedik. Ebben a dolgozatban a szubkritikus eseten van a hangsúly, így a superkritikus esetet most nem vizsgálom.

3.3. A $\phi_j^H(\rho)$ differenciálegyenletének megoldása

A (64)-es differenciálegyenletnek 4 darab szinguláris pontja van: $z_1 = -\tilde{g}$ a másik a végtelenben, míg a $z_2 = 0$ kétszeres szinguláris pont. A szinguláris pontok száma miatt (64) Heun-féle differenciálegyenlet[12] és $z_2 = 0$ szinguláris pontoknak a konfluenciája miatt (64) egy Konfluens Heun-féle differenciálegyenlet. Ez általánosan

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}w(z) + \left(4p + \frac{\gamma}{z} + \frac{\delta}{z-1}\right)\frac{\partial}{\partial z}w(z) + \left(\frac{\sigma}{z} + \frac{4p\alpha z - \sigma}{z-1}\right)w(z) = 0 \quad (65)$$

alakú[14], aminek megoldása

$$w(z) = C_1 \text{Hc}(4p, -1 + \gamma, -1 + \delta, -2p(\delta - 2\alpha + \gamma), \frac{1}{2}(-\delta + 4p)\gamma - \sigma + \frac{1}{2}, z) + \\ + C_2 z^{1-\gamma} \text{Hc}(4p, 1 - \gamma, -1 + \delta, -2p(\delta - 2\alpha + \gamma), \frac{1}{2}(-\delta + 4p)\gamma - \sigma + \frac{1}{2}, z), \quad (66)$$

ahol $\text{Hc}(a, b, c, d, e, z)$ a konfluens Heun függvény. A cél az, hogy a (64)-es egyenletet (65)-ös alakra hozzuk. Ennek érdekében el kell végezni egy s-homotopikus transzformációt[15]

$$\phi_j^H(\rho) = w(\rho) e^{\pm i \frac{\rho}{\sqrt{2}} \rho \pm \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}, \quad (67)$$

aminek eredményeképpen a (64)-es egyenlet a következővé alakul[16]:

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2}w(\rho) + \left(\pm i\sqrt{2} + \frac{1 \pm 2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{\rho} - \frac{1}{\rho + \tilde{g}}\right)\frac{\partial}{\partial \rho}w(\rho) + \\ + \left(\frac{\pm \frac{i}{\sqrt{2}} + \tilde{g} + \frac{1}{2\tilde{g}} - \frac{\pm \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{g} + i\sqrt{2}\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{\rho} + \frac{\mp \frac{i}{\sqrt{2}} - \frac{1}{2\tilde{g}} + \frac{\pm \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{g}}{\rho + \tilde{g}}\right)w(\rho) = 0.$$

Következőnek az új $z = -\frac{\rho}{\tilde{g}}$ változót, aminek hatására az egyenlet

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2}w(z) + \left(\pm i\sqrt{2}\tilde{g} + \frac{1 \pm 2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{z} - \frac{1}{z-1}\right)\frac{\partial}{\partial z}w(z) + \\ + \left(\frac{\mp \frac{i}{\sqrt{2}}\tilde{g} - \tilde{g}^2 - \frac{1}{2} \pm \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}} - i\sqrt{2}\tilde{g}\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{z} + \right. \\ \left. + \frac{\pm \frac{i}{\sqrt{2}}\tilde{g} + \frac{1}{2} \mp \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}{z-1}\right)w(z) = 0$$

alakú lesz. Összehasonlítva (65)-tel és (66)-tal a keresett megoldás, ami már korlátozza az előjeleket:

$$w(z) = C_1 \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, z) + \\ + C_2 z^{-2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}} \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, -2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, z). \quad (68)$$

Ennek és (67) alapján a keresett megoldás:

$$\phi_j^H(\rho) = C_1 e^{-i\frac{\rho}{\sqrt{2}}} \rho^{\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}} \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) + \\ + C_2 e^{-i\frac{\rho}{\sqrt{2}}} \rho^{-\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}} \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, -2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}}). \quad (69)$$

A megoldás alapján rögtön látni lehet, hogy az $S = 1$ esetben is megjelenik egy kritikus g érték, hiszen teljesen más típusú lesz a (69)-es függvény, ha a ρ kitevőjében vagy a konfluens Heun függvény második paraméterében szereplő négyzetgyök alatt negatív szám van. A legkisebb j értéke alapján a kritikus kölcsönhatás: $g_c = \frac{1}{\sqrt{2}}$. A továbbiakban a szubkritikus esettel foglalkozom, azaz amikor $g < g_c$.

Szubkritikus esetben ki kell használni a konfluens Heun függvény normálását[13]

$$\text{Hc}(a, b, c, d, e, 0) = 1,$$

ami alapján látható, hogy (69) akkor nem fog divergálni $\rho \rightarrow 0$ esetben, ha $C_2 = 0$. Felhasználva az (58)-as és (60)-as képletet, a radiális egyenletek megoldását, $\epsilon \neq 0$ esetén, az alábbi formában írhatjuk:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{e^{-i\frac{\rho}{\sqrt{2}}} \rho^{\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}}{\rho + \tilde{g}} \begin{pmatrix} (j - \frac{1}{2} - \frac{i\rho}{\sqrt{2}} + \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}) \text{Hc}(\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4, \chi_5, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) \\ (\rho + \tilde{g}) \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) \\ (-j - \frac{1}{2} - \frac{i\rho}{\sqrt{2}} + \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}) \text{Hc}(\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4, \chi_5, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) \end{pmatrix} - \\ - \frac{e^{-i\frac{\rho}{\sqrt{2}}} \rho^{\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}}}{\rho + \tilde{g}} \frac{\epsilon}{g} \begin{pmatrix} \text{HcP}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) \\ 0 \\ \text{HcP}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) \end{pmatrix} \quad (70)$$

,ahol $\text{Hc}(\chi_1, \chi_2, \chi_3, \chi_4, \chi_5, -\frac{\rho}{\tilde{g}}) = \text{Hc}(-i\sqrt{2}\tilde{g}, +2\sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{\tilde{g}^2}{2}}, -2, -\tilde{g}^2, \tilde{g}^2 + \frac{3}{2}, -\frac{\rho}{\tilde{g}})$. Továbbá a konfluens Heun függvény deriváltjának a fent látható jelölése:

$$\frac{d}{dz} \text{Hc}(a, b, c, d, e, z) = \text{HcP}(a, b, c, d, e, z).$$

3.4. A normálási tényező meghatározása

A normálási feltétel megegyezik (36)-tal. Az (56)-os kifejezés alapján, ezt szimbolikusan

$$\int_0^\infty |\phi_j^A(r)|^2 + |\phi_j^H(r)|^2 + |\phi_j^B(r)|^2 dr = \frac{1}{2\pi} \delta(0), \quad (71)$$

alakban írhatjuk. A normálási tényező meghatározásához, tehát a konfluens Heun függvények integráljait kell kiszámolni. E helyett azt használjuk ki, hogy a jobb oldal divergens, tehát a bal oldalon elegendő azokat a tagokat figyelembe venni, amelyeknek az integrálja, szintén Dirac-deltat eredményez, hiszen a véges tagok a divergens tagok mellett elhanyagolhatóak. Ezt figyelembe véve elég a bal oldali kifejezés aszimptotikus alakjának az integrálját elvégezni.

3.4.1. A probléma aszimptotikus megoldása

Térjünk vissza az (57)-es egyenletrendszerhez. Azt lehet észrevenni, hogy ha az első egyenletből kivonjuk a harmadikat, akkor eltűnik a $\phi_j^H(r)$ deriváltja és a három függvény között egy algebrai összefüggést kapunk. Ennek tekintetében vezessük be a következő függvényeket:

$$\begin{aligned} \phi_j^+(r) &= \phi_j^A(r) + \phi_j^B(r), \\ \phi_j^-(r) &= \phi_j^A(r) - \phi_j^B(r). \end{aligned} \quad (72)$$

Az (57)-es egyenlet az első és harmadik egyenlet összeadásával és kivonásával az alábbi

$$\begin{pmatrix} \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{1}{r} - 2\frac{\partial}{\partial r} & 0 \\ \frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r} & \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{-j}{r} \\ 0 & \frac{-2j}{r} & \epsilon + \frac{g}{r} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^-(r) \end{pmatrix} = 0, \quad (73)$$

alakra hozhatjuk. A harmadik egyenletből kifejezhető $\phi_j^-(r)$, amit ha berakunk a második egyenletbe, akkor az egyenletrendszert 2×2 -re redukáltuk:

$$\begin{pmatrix} \epsilon + \frac{g}{r} & \frac{1}{r} - 2\frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r} & \epsilon + \frac{g}{r} - \frac{2j^2}{r^2(\epsilon + \frac{g}{r})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (74)$$

Amiből végül az

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r}) & \frac{1}{2r} - \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})(\frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r}) & \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 - \frac{j^2}{r^2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \end{pmatrix} = 0 \quad (75)$$

egyenletrendszerhez jutunk. Amit a grafénnél látott diagonalizálási eljárással a következő alakra hozhatunk (lsd. A.3.):

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 + \frac{-j^2 - \frac{3}{4}}{r^2}\right) & -\frac{g}{r^2} + \frac{2j^2}{r^3} \frac{(2\epsilon + \frac{g}{r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})^2} \\ \frac{g}{2r^2} & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{\tilde{g}}{r})^2 + \frac{-j^2 + \frac{1}{4}}{r^2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (76)$$

Ennek az egyenletrendszernek az első sorában fogunk élni aszimptotikus közelítéssel. Vizsgáljuk meg, hogy mikor teljesül az

$$\frac{g}{r^2} \gg \frac{2j^2}{r^3} \frac{(2\epsilon + \frac{g}{r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})^2}$$

összefüggés. Szubkritikus esetben $g < \frac{1}{2}$, emiatt elég vizsgálni az

$$\frac{g}{r^2} \gg \frac{4j^2}{\epsilon r^3} \quad (77)$$

összefüggést. Látható, hogy ha $g \approx \frac{4j^2}{\epsilon}$, akkor (77) $r \rightarrow \infty$ esetben teljesül, ami pont a keresett aszimptotikus eset. A megoldandó egyenlet, tehát

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 + \frac{-j^2 - \frac{3}{4}}{r^2}\right) & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{2r^2} & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{\tilde{g}}{r})^2 + \frac{-j^2 + \frac{1}{4}}{r^2}\right) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \end{pmatrix} = 0. \quad (78)$$

Ennek az aszimptotikának egy másik következménye a (73)-as egyenletrendszer harmadik egyenletére vonatkozóan az, hogy

$$\phi_j^-(r) = -\frac{2j}{\epsilon r + g} \phi_j^H(r), \quad r \rightarrow \infty \implies \phi_j^A(r) \approx \phi_j^B(r). \quad (79)$$

A (78)-as egyenletrendszer mátrixát a (18)-nál látott módszerrel

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 - \frac{j^2 + \frac{1}{4}}{r^2}\right) + \Lambda & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \left(\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 - \frac{j^2 + \frac{1}{4}}{r^2}\right) + \Lambda \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{1}{2r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{2r^2} & \frac{1}{2r^2} - \Lambda \end{pmatrix} \quad (80)$$

alakba írjuk. Λ -t úgy választjuk, hogy annak az állapotvektorra vett hatása 0 legyen, ekkor:

$$\begin{vmatrix} -\frac{1}{2r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{2r^2} & \frac{1}{2r^2} - \Lambda \end{vmatrix} = 0 \rightarrow \Lambda = \pm \frac{\sqrt{\frac{1}{4} - \frac{g^2}{2}}}{r^2}. \quad (81)$$

Vezessük be a könnyebbség kedvéért a következőket:

$$\begin{aligned}\gamma &= \sqrt{j^2 + \frac{1}{4} - \frac{g^2}{2}}, \\ \gamma_0 &= \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{g^2}{2}}.\end{aligned}\tag{82}$$

A diagonalizálás eredményeképpen, tehát a $\phi_j^+(r)$ és $\phi_j^H(r)$ -t megoldó differenciálegyenlet:

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi(r) + \left(\frac{\epsilon^2}{2} + \frac{\epsilon g}{r} - \frac{\gamma^2 \mp \gamma_0}{r^2} \right) \phi(r) = 0.\tag{83}$$

Elosztva $\frac{|\epsilon^2|}{2}$ -vel és az új $\rho = \frac{|\epsilon|r}{\sqrt{2}}$ változót és $\tilde{g} = s_\epsilon g$ állandót bevezetve a megoldandó egyenlet:

$$\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} \phi(\rho) + \left(1 + \frac{\sqrt{2}\tilde{g}}{\rho} - \frac{\gamma^2 \mp \gamma_0}{\rho^2} \right) \phi(\rho) = 0.\tag{84}$$

Aminek megoldásai a grafénél látott Coulomb hullámfüggvények, a regularitást figyelembe véve a megoldást az alábbi Coulomb függvények lineáris kombinációi adják: $F_{L_1}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho)$ és $F_{L_2}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho)$, ahol

$$\begin{aligned}L_1 &= -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + j^2 + \gamma_0^2 + \gamma_0}, \\ L_2 &= -\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + j^2 + \gamma_0^2 - \gamma_0}.\end{aligned}\tag{85}$$

A (80)-as képlet második mátrixa hasonló okokból, mint a grafénél most is rögzíti $\phi_j^+(r)$ és $\phi_j^H(r)$ arányát:

$$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2r^2} - \Lambda & -\frac{g}{r^2} \\ \frac{g}{2r^2} & \frac{1}{2r^2} - \Lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_j^+(r) \\ \phi_j^H(r) \end{pmatrix} = 0,\tag{86}$$

ahol mint már láttuk $\Lambda = \pm \frac{\gamma_0}{r^2} = \lambda \frac{\gamma_0}{r^2}$. Ha $\lambda = +1$, amihez tartozó megoldás $F_{L_2}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho)$, akkor a két függvény aránya:

$$\frac{\phi_j^+(r)}{\phi_j^H(r)} = \frac{2\gamma_0 - 1}{g} = \frac{-2(\frac{1}{2} - \gamma_0)}{s_g \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{4} - \gamma_0^2}} = -s_g \sqrt{2} \frac{\sqrt{1 - 2\gamma_0}}{\sqrt{1 + 2\gamma_0}}.\tag{87}$$

Ha $\lambda = -1$, amihez az $F_{L_1}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho)$ megoldás tartozik, akkor a függvények aránya:

$$\frac{\phi_j^+(r)}{\phi_j^H(r)} = \frac{-2\gamma_0 - 1}{g} = \frac{-2(\frac{1}{2} + \gamma_0)}{s_g \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{4} - \gamma_0^2}} = -s_g \sqrt{2} \frac{\sqrt{1 + 2\gamma_0}}{\sqrt{1 - 2\gamma_0}}.\tag{88}$$

Végül a teljes megoldást a következő alakban kell írni:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{a_+^2 + b_+^2 + c_+^2}} \begin{pmatrix} a_+ \\ b_+ \\ c_+ \end{pmatrix} F_{L_2}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) + \frac{1}{\sqrt{a_-^2 + b_-^2 + c_-^2}} \begin{pmatrix} a_- \\ b_- \\ c_- \end{pmatrix} F_{L_1}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho), \quad (89)$$

ahol az $a_{\pm}, b_{\pm}$ és $c_{\pm}$ együtthatókat a (87)-es és (88)-as arányokból lehet kiszámolni. A (79)-es feltételből az ered, hogy $\phi_j^+(r) = 2\phi_j^A(r) = 2\phi_j^B(r)$. Mindezek alapján (89)-et felírhatjuk végleges alakjában:

$$\frac{1}{N_j} \begin{pmatrix} \phi_j^A(r) \\ \phi_j^H(r) \\ \phi_j^B(r) \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{1-2\gamma_0} \\ s_g \sqrt{2+4\gamma_0} \\ -\sqrt{1-2\gamma_0} \end{pmatrix} F_{L_2}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -\sqrt{1+2\gamma_0} \\ s_g \sqrt{2-4\gamma_0} \\ -\sqrt{1+2\gamma_0} \end{pmatrix} F_{L_1}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho). \quad (90)$$

Mostmár, hogy a kezünkben az aszimptotikus megoldás kiszámolhatjuk a (71)-es integrált, ami a következő alakúvá írható (90) alapján:

$$N_j^2 \int_0^\infty F_{L_1}^2(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) + F_{L_2}^2(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) + \sqrt{2}|\tilde{g}| F_{L_1}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) F_{L_2}(-\frac{\tilde{g}}{\sqrt{2}}, \rho) dr = \frac{1}{2\pi} \delta(0), \quad (91)$$

A bal oldali integrál elvégezhető a (41)-es képlet segítségével, aminek alapján a normálási tényező:

$$N_j^{-2} = 2\sqrt{2}\pi^2 \left(1 + \frac{|\tilde{g}|}{\sqrt{2}} \cos(\Theta_{L_1} - \Theta_{L_2}) \right). \quad (92)$$

Az (56)-os, (70)-es és (92)-es képlet ismerete azt jelenti, hogy a Dirac-Kepler problémát az $S = 1$ és szubkritikus esetben megoldottam.

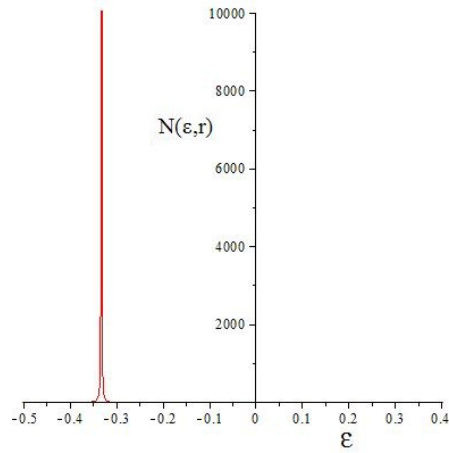
3.5. Lokális állapotsűrűség

A lokális állapotsűrűség kifejezése, ahogy azt (44) is mutatja

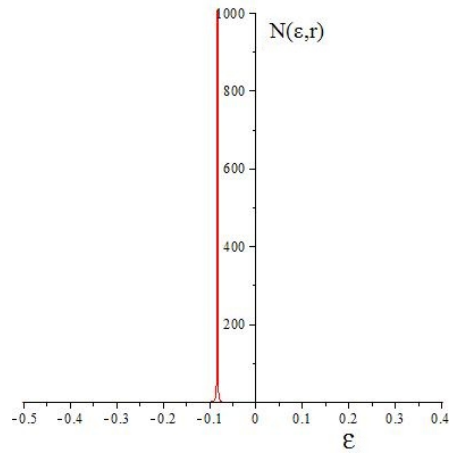
$$N(\epsilon, r) = \sum_{j=-\infty}^{\infty} |\psi_{j,\epsilon}|^2 = \sum_{j=-\infty}^{\infty} \frac{1}{r} (|\phi_j^A(r)|^2 + |\phi_j^H(r)|^2 + |\phi_j^B(r)|^2) \quad (93)$$

alakú, ahol az összegzés most egész j értékeket vesz fel(52). Ebbe a kifejezésbe kell behelyettesíteni a (70)-es képletben adott megoldást. Sok érdekesség vehető észre ebben a kifejezésben. Az első az, hogy $\epsilon \rightarrow 0$ esetben nem fog divergálni a kifejezés, pedig a $\mathcal{T}_3$ rács

tiszta esetének az állapotsűrűségében van egy Dirac-delta[3], viszont a divergencia megjelenik, akkor amikor $|\epsilon|r + \tilde{g} = 0$. Ez azt jelenti, hogy a tiszta eset állapotsűrűségének a divergenciája eltolódik a Coulomb kölcsönhatás erősségétől függően. A második pedig, hogy r növelésével ez a divergencia tart vissza az origóba, ami megegyezik azzal a várakozással, hogy távolodva a szennyezőtől a tiszta eset állapotsűrűségeit kapjuk vissza. Az első két képen ennek a Dirac-delta szerű résznek az eltolódása látható ($g = \frac{1}{3}$).



9. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 1$ esetben



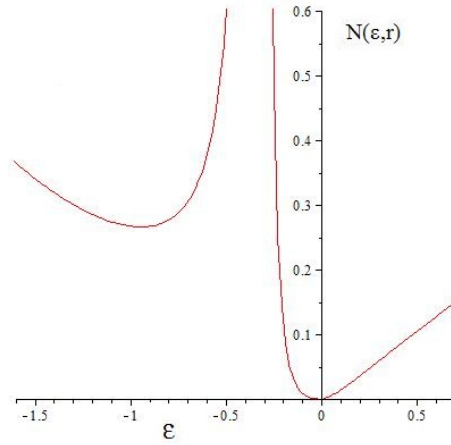
10. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 4$ esetben

A tiszta esetben az állapotsűrűségben egzakt Dirac-delta jelenik meg, viszont ebben az esetben megfigyelhető a divergencia kiszélesedése, ez a kiszélesedés az állapotsűrűség kifeje-

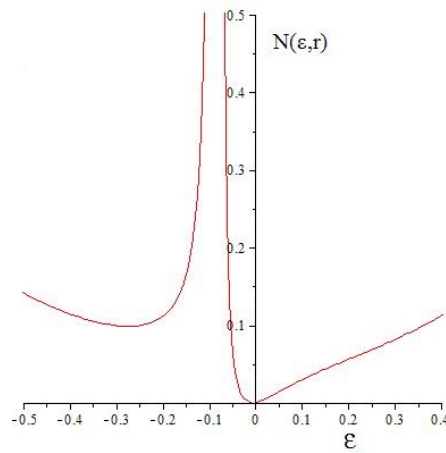
zésében megjelenő

$$\frac{1}{(|\epsilon|r + \tilde{g})^2} \quad (94)$$

szorzófaktornak köszönhető, ez a divergencia mértéke is egyben.



11. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 1$ esetben



12. ábra. A lokális állapotsűrűség $r = 4$ esetben

Ezek az ábrák jól látható az energiaspektrum diszperzív része esetében a lokális állapotsűrűség, ami a grafénéhoz hasonlóan lineáris, ami megfelel a várakozásoknak.[3]

4. Összefoglalás

A dolgozat során az általánosított Dirac egyenlettel leírható kétdimenziós rácsoakat vizsgáltam. Az egyik ilyen a grafénrács volt, amely sok felhasználási lehetőséget tartogat magában, a másik pedig az érdekes tulajdonságokkal bíró, például diszperzió nélküli sáv, úgynevezett $\mathcal{T}_3$ rács, hasonló diszperzió nélküli sávval rendelkezik, szoros kötésű közelítésben, az élcentrált négyzetrács (CuO_2). Megvizsgáltam, hogy ha ezekbe a rácsoakra töltéssel rendelkező szennyeződés kerül, akkor mi történik a lokális állapotsűrűséggel. Ehhez a Dirac-Kepler problémát kellett megoldani a pszeudo-spin $S = \frac{1}{2}$ és $S = 1$ esetben.

A megoldás meneténél a [4] cikkre támaszkodtam, de számolásaimmal néhol eltértem tőlük. A megoldás során mindkettő esetben nyilvánvalóvá vált, hogy létezik egy kritikus kölcsönhatási érték g_c , ami felett a probléma megoldásainak tulajdonságai megváltoznak. Például a szuperkritikus eset tanulmányozásánál kiderül, hogy (23) és (24)-ben közölt összes megoldás jól viselkedik az origóban, továbbá (69)-ben $C_2 \neq 0$ is jól viselkedő megoldást ad. Ennek kezelésére egy levágást kell bevezetni az origó körül. Ebben a dolgozatban, viszont csak a szubkritikus $g < g_c$ esettel foglalkoztam és ennek részleteibe merültem bele. Ennek eredménye az általánosított Dirac egyenlet megoldása Coulomb potenciál jelenléte mellett, valamint a lokális állapotsűrűségek viselkedésének vizsgálata. Megemlítem még a (41)-es képletnél található formulát, amit a szakirodalomban nem találtam meg, ezért saját magam számoltam ki. (ld. A.2.)

Az eredmények helyességét tesztelni lehetne a szoros kötésű közelítés Hamilton operátorának numerikus tanulmányozásával. A grafén esetében, a [4] cikkben ez már megtörtént, továbbá kísérletileg is ellenőrizték [17]. Ezek eredményei a Dirac egyenlettel való leírás helyességét támasztották alá.

Hivatkozások

- [1] Novoselov, K. S. et al. Science 306, 666-669 (2004).
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov, Nat. Mater. 6, 183 (2007).
- [3] B. Dóra, J. Kailasvuori, R. Moessner, Phys. Rev. B 84, 195422 (2011).
- [4] V. M. Pereira, J. Nilsson, A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. 99, 166802 (2007).
- [5] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. 81, 109-162 (2009).
- [6] D. Bercioux, D. F. Urban, H. Grabert and W. Häusler, Phys. Rev. A 80, 063603 (2009).
- [7] Eduardo V. Castro, K. S. Novoselov, S. V. Morozov, N. M. R. Peres, J. M. B. Lopes dos Santos, Johan Nilsson, F. Guinea, A. K. Geim, A. H. Castro Neto, J. Phys.: Condens. Matter 22, 175503 (2010).
- [8] Abramovitz M., Stegun I.A. (eds.) Handbook of mathematical functions (10ed., NBS, 1972)
- [9] F. L. Yost, John A. Wheeler, and G. Breit, Phys. Rev. 49, 174-189 (1936).
- [10] Abramovitz M., Stegun I.A. (eds.) Handbook of mathematical functions (10ed., NBS, 1972) 14.6.6 képlete.
- [11] Abramovitz M., Stegun I.A. (eds.) Handbook of mathematical functions (10ed., NBS, 1972) 9.1.76 képlete.
- [12] Sergei Yu. Slavyanov, Wolfgang Lay, Special Functions: A Unified Theory Based on Singularities, Oxford University Press, Oxford and New York, 2000.
- [13] A. Ronveaux, Editor, Heun's Differential Equations, Oxford University Press, Oxford and New York, 1995.
- [14] A. Ronveaux, Editor, Heun's Differential Equations, Oxford University Press, Oxford and New York, 1995. 1.2.27 képlete

- [15] A. Ronveaux, Editor, Heun's Differential Equations, Oxford University Press, Oxford and New York, 1995. 1.1.9 képlete
- [16] A. Ronveaux, Editor, Heun's Differential Equations, Oxford University Press, Oxford and New York, 1995. 1.1.10 képlete
- [17] Yang Wang, Victor W. Brar, Andrey V. Shytov, Qiong Wu, William Regan, Hsin-Zon Tsai, Alex Zettl, Leonid S. Levitov, Michael F. Crommie, Nature Physics 8, 653-657 (2012).

A. Matematikai függelék

A.1. H és J_z felcserélési relációja

A következő felcserélési relációkat ismerjük ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned}[p_x, L_z] &= -ip_y, \\ [p_y, L_z] &= ip_x.\end{aligned}$$

Továbbá tudjuk, hogy L_z a centrális potenciál kifejezésével felcserélhető (lsd. H-atom probléma), ezek tekintetében:

$$[H, L_z] = \nu_F([S_x p_x, L_z] + [S_y p_y, L_z]) = \nu_F(S_x [p_x, L_z] + S_y [p_y, L_z]) = \nu_F(-iS_x p_y + iS_y p_x). \quad (95)$$

A következő felcserélési relációhoz a spin operátorok felcserélési relációit kell használni:

$$[S_x, S_y] = iS_z, \quad [S_y, S_z] = iS_x, \quad [S_z, S_x] = iS_y.$$

Megjegyzendő, hogy az impulzus operátora, mint differenciáloperátor felcserél a számokból álló spin operátorokkal:

$$[H, S_z] = \nu_F(p_x [S_x, S_z] + p_y [S_y, S_z]) = \nu_F(-p_x S_y + ip_y S_x) = \nu_F(iS_x p_y - S_y p_x). \quad (96)$$

A (94)-es és (95)-ös képletből következik az (5)-ös képlet.

A.2. A Coulomb függvények integrálja

A Coulomb függvények aszimptotikus viselkedése $z \rightarrow \infty$ és addíciós tételek:

$$\begin{aligned} F_L(\eta, z) &\sim \sin(z - \eta \ln 2z - L \frac{\pi}{2} + \sigma_L) = \sin(z - \eta \ln 2z + \Theta_L), \\ \sigma_L &= \arg \Gamma(L + 1 + i\eta), \\ \sin(\alpha + \beta) &= \sin \alpha \cos \beta + \sin \beta \cos \alpha, \\ \cos(\alpha - \beta) &= \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta \end{aligned}$$

Mivel az integrál imprópius, ezért elegendő a Coulomb függvény aszimptotikus viselkedését venni, továbbá mivel $z \gg \ln z$:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty F_{L_1}(\eta, \xi z) F_{L_2}(\eta, \xi' z) dz = \int_0^\infty \sin(\xi z + \Theta_{L_1}) \sin(\xi' z + \Theta_{L_2}) dz = \\ &= \int_0^\infty \sin(\xi z) \sin(\xi' z) \cos \Theta_{L_1} \cos \Theta_{L_2} + \cos(\xi z) \cos(\xi' z) \sin \Theta_{L_1} \sin \Theta_{L_2} dz + \\ &+ \int_0^\infty \sin(\xi z) \cos(\xi' z) \cos \Theta_{L_1} \sin \Theta_{L_2} + \sin(\xi' z) \cos(\xi z) \sin \Theta_{L_1} \cos \Theta_{L_2} dz. \end{aligned} \quad (97)$$

Mivel nekünk $\xi \rightarrow \xi'$ eset az érdekes, ezért most is azt nézzük. Ennek alapján (96) második sorában lévő z függő tagok megegyeznek, ha $z \rightarrow \infty$. A harmadik sorban lévő kifejezések pedig a Dirac-delta mellett elhanyagolhatóak, ezért (96)-ot a következőképpen lehet folytatni:

$$(\cos \Theta_{L_1} \cos \Theta_{L_2} + \sin \Theta_{L_1} \sin \Theta_{L_2}) \int_0^\infty \sin(\xi z) \sin(\xi' z) dz = \cos(\Theta_{L_1} - \Theta_{L_2}) \frac{\pi}{2} \delta(\xi - \xi'). \quad (98)$$

A.3. A (75)-ös egyenletrendszer részleges diagonalizálása

Első lépésben (75) első egyenletéből kifejezzük $\phi_j^+(r)$ -t a $\phi_j^H(r)$ függvényében

$$\phi_j^+(r) = \frac{(2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}) \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}}, \quad (99)$$

amit behelyettesítjük (75) második egyenletébe:

$$[\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 - \frac{j^2}{r^2}] \phi_j^H(r) + \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})(\frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r}) \frac{(2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}) \phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} = 0. \quad (100)$$

Most, a(99) második tagjában szereplő deriváltat kell elvégezni:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})(\frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r}) \frac{(2\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r})\phi_j^H(r)}{\epsilon + \frac{g}{r}} = (\epsilon + \frac{g}{r})(\frac{1}{2r} + \frac{\partial}{\partial r}) \frac{(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{2r})\phi_j^H(r)}{(\epsilon + \frac{g}{r})} = \\
& (\epsilon + \frac{g}{r}) \frac{\frac{1}{2r} \frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{4r^2}}{(\epsilon + \frac{g}{r})} + (\epsilon + \frac{g}{r}) \frac{\frac{\partial^2 \phi_j^H(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{2r} \frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} + \frac{\phi_j^H(r)}{2r^2}}{(\epsilon + \frac{g}{r})} + \\
& (\epsilon + \frac{g}{r}) \frac{\frac{g}{r^2} (\frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{2r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})^2} = [(\frac{1}{2r} \frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{4r^2}) + (\frac{\partial^2 \phi_j^H(r)}{\partial r^2} - \frac{1}{2r} \frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} + \frac{\phi_j^H(r)}{2r^2})] + \\
& \frac{g}{r^2} \frac{(\frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{2r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})} = \frac{\partial^2 \phi_j^H(r)}{\partial r^2} + \frac{\phi_j^H(r)}{4r^2} + \frac{g}{r^2} \frac{(\frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{2r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})}. \tag{101}
\end{aligned}$$

Ezt visszahelyettesítve (99)-be azt kapjuk hogy

$$[\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 - \frac{j^2}{r^2}] \phi_j^H(r) + \frac{\partial^2 \phi_j^H(r)}{\partial r^2} + \frac{\phi_j^H(r)}{4r^2} + \frac{g}{r^2} \frac{(\frac{\partial \phi_j^H(r)}{\partial r} - \frac{\phi_j^H(r)}{2r})}{(\epsilon + \frac{g}{r})} = 0. \tag{102}$$

Most figyelembe véve hogy (101) utolsó tagjában pontosan a (98)-ban szereplő $\phi_j^+(r)$ fele jelenik meg, ezért felírható, hogy:

$$[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + (\frac{1}{2}(\epsilon + \frac{g}{r})^2 + \frac{-j^2 + \frac{1}{4}}{r^2})] \phi_j^H(r) + \frac{g}{2r^2} \phi_j^+(r) = 0. \tag{103}$$

Hasonló módszerrel kell kifejezni a másik függvényt is.