О.О. СОБОЛЬ

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка
*(Просп. Академіка Глушкова, 2, Київ 03022; e-mail: sobololeks@ukr.net)*

УДК 538.915

# ВАРІАЦІЙНИЙ МЕТОД ОБЧИСЛЕННЯ КРИТИЧНОЇ ВІДСТАНІ В ЗАДАЧІ ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ У ГРАФЕНІ

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

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

## 1. Вступ

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

Графен має кристалічну ґратку у вигляді бджолиних сот. У наближенні сильного зв'язку спектр низькоенергетичних квазічастинкових збуджень є лінійним, і вони описуються безмасовим $(2 + 1)$-вимірним рівнянням Дірака [3–6]. Таким чином, у неперервній границі маємо ефективну квантовопольову теорію з $(2 + 1)$-вимірними діраківськими ферміонами, що взаємодіють зі звичайним тривимірним потенціалом Кулона $\sim 1/r$. Ці обставини свідчать про можливість твердотільної реалізації експериментів для спостереження таких явищ КЕД, як парадокс Клейна, ефект Швінгера (народження пар у сильному зовнішньому електричному полі), надкритичний атомний колапс та ін., які ще не спостерігалися в природі. І дійсно, в графені було виявлено клейнівське тунелювання [7] і, зовсім нещодавно, експериментально спостерігався надкритичний атомний колапс заряджених домішок [8].

Розв'язок релятивістської задачі Кеплера з урахуванням скінченних розмірів атомного ядра [9] показав, що при перевищенні так званого *критичного* заряду ядра $Z_{\rm cr} \approx 170$ енергетичні рівні зв'язаних станів занурюються в нижній континуум і спостерігається виліт позитронів [10, 11]. Однак, ядер з таким зарядом не існує, тому ефект так і не був спостережений. Згодом, виникла ідея про лобові (або майже лобові) зіткнення ядер важких атомів, наприклад, урану [10, 12–14]. У цьому випадку їх сумарний заряд перевищує критичний і існує така відстань між ядрами, за якої відбувається занурення найнижчого зв'язаного стану в нижній континуум. Ця відстань також називається *критичною*. На жаль, в релятивістській задачі двох центрів змінні не розділяються в жодній системі координат, а тому побудувати аналітичний розв'язок не вдається [10, 11]. Проте, були проведені розрахунки за допомогою наближених методів квантової механіки, зокрема варіаційного [15], і було отримано залежності критичної відстані між ядрами від повного заряду системи.

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

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

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

## 2. Постановка задачі

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

$$H = v_{\mathrm{F}}\boldsymbol{\tau}\boldsymbol{p} + \xi\Delta\tau_z + V(r), \tag{1}$$

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

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

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

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

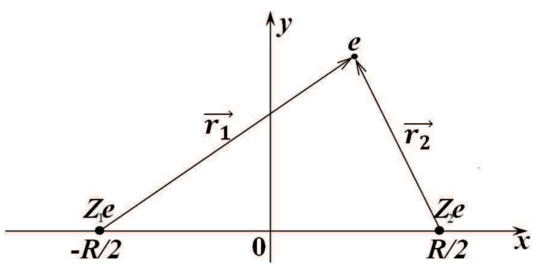


***Рис. 1.*** Електрон у полі двох кулонівських домішок

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

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

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

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

Якщо виразити компоненту $\chi$ з другого рівняння системи (4), то отримаємо диференціальне рівняння другого порядку на другу компоненту $\phi$:

$$(\partial_x^2 + \partial_y^2)\phi + \frac{\frac{\partial V}{\partial x} - i\frac{\partial V}{\partial y}}{E - V + \Delta}\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} + i\frac{\partial\phi}{\partial y}\right) +$$

$$+ v_{\mathrm{F}}^{-2}\left((E - V)^2 - \Delta^2\right)\phi = 0. \quad (5)$$

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

### *2.1. Асимптотична поведінка хвильової функції*

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

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

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

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

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

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

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

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

Щоб дослідити асимптотичну поведінку функції безпосередньо біля однієї з домішок, зручно перейти до еліптичної системи координат $(\xi,\,\eta)$:

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

Нові координати змінюються в діапазонах:

$$1 \le \xi < \infty, \qquad -1 \le \eta \le 1,$$

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

В еліптичних координатах потенціал взаємодії має вигляд

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

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

$$\frac{4}{R^2(\xi^2 - \eta^2)}\left[\sqrt{\xi^2 - 1}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\sqrt{\xi^2 - 1}\frac{\partial}{\partial\xi}\right) +\right.$$

$$\left. + \sqrt{1 - \eta^2}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\sqrt{1 - \eta^2}\frac{\partial}{\partial\eta}\right)\right]\phi +$$

$$+ \frac{4}{R^2\xi(\xi^2 - \eta^2)^3}\left[\xi^4\eta + 3\xi^2\eta^3 - 3\xi^2\eta - \eta^3 - \right.$$

$$\left. - i\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}(\xi^3 + 3\xi\eta^2)\right] \times$$

$$\times\left[\left(\eta(\xi^2 - 1) + i\xi\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\right)\frac{\partial\phi}{\partial\xi} + \right.$$

$$\left. + \left(\xi(1 - \eta^2) - i\eta\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\right)\frac{\partial\phi}{\partial\eta}\right] +$$

$$+ \left(\frac{4\zeta^2\xi^2}{R^2(\xi^2 - \eta^2)^2} - \frac{4\zeta m\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)}\right)\phi = 0. \quad (12)$$

Шукатимемо розв'язок у вигляді: $\phi(\xi,\eta) = \phi(\mu)$, де $\mu = \xi^2 - \eta^2 = 4r_1r_2/R^2$. Після підстановки до рівняння (12) залишимо лише найбільш вагомі доданки і отримаємо рівняння

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

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

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

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

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

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

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

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

### 3. Варіаційний метод

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

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

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

за умови збереження норми:

$$N = \int \Psi^* \Psi dxdy = \int \Bigg[ v_{\rm F}^{-2}|\phi|^2 + \\ + (E - V + \Delta)^{-2} \left| \frac{\partial \phi}{\partial x} + i \frac{\partial \phi}{\partial y} \right|^2 \Bigg] dxdy. \tag{18}$$

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

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

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

$$U = \frac{EV}{v_{\rm F}^2} - \frac{V^2}{2v_{\rm F}^2} + \frac{\triangle V}{4W} + \frac{3}{8}\frac{(\boldsymbol{\nabla} V)^2}{W^2}. \tag{20}$$

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

$$N = \int \Bigg[ |\boldsymbol{\nabla}\psi|^2 + \\ + i \left( \frac{\boldsymbol{\nabla} V}{2W} \times \boldsymbol{\nabla}\psi^* \right) \psi - i\psi^* \left( \frac{\boldsymbol{\nabla} V}{2W} \times \boldsymbol{\nabla}\psi \right) + \\ + \left( \frac{W^2}{v_{\rm F}^2} + \frac{\triangle V}{2W} + \frac{5(\boldsymbol{\nabla} V)^2}{4W^2} \right) |\psi|^2 \Bigg] W^{-1} dxdy \tag{21}$$

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

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

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

Тут $\psi_k(\mu)$ – набір невідомих функцій, $\nu = \nu(\xi, \eta)$ – фіксована функція координат, яка є незалежною до $\mu$. В роботі [15] розглядались два варіанти вибору функції $\nu$. Отримані результати були досить близькими, тому в цій роботі зупинимось на одному з варіантів, а саме: $\nu = \eta^2/(\xi^2 - \eta^2) = (r_1 - r_2)^2/4r_1r_2$.

Зробивши підстановку (22) до функціонала (19) та проінтегрувавши по $\nu$, матимемо

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

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

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

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

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

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

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

$$\psi_i'(\mu) = \sum_{j=1}^{N} Y_{ij}(\mu)\psi_j(\mu). \tag{25}$$

Тоді отримаємо нелінійне матричне рівняння Ріккаті на матрицю $\hat{\mathbf{Y}}$:

$$\hat{\mathbf{Y}}' = \hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{Y}} - \hat{\mathbf{Y}}^2, \tag{26}$$

де матриці-коефіцієнти мають вигляд

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

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

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

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

Означимо нову матрицю $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}$:

$$\tilde{\psi}_k'(\mu) = (Y_{\mathbf{S}})_{kl}(\mu)\tilde{\psi}_l(\mu). \tag{30}$$

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

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}^{-1}\hat{\mathbf{Y}}\hat{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{S}}^{-1}\hat{\mathbf{S}}'. \tag{31}$$

Матриця $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}$ також задовольняє рівняння Ріккаті:

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}' = \hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{B}}_{\mathbf{S}}\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}} - \hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^2. \tag{32}$$

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

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

$$\begin{aligned} &\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{(0)} = \mu^{\lambda_0}\left(\hat{\mathbf{Y}}_1^{(0)} + \mu\hat{\mathbf{Y}}_2^{(0)} + \mu^2\hat{\mathbf{Y}}_3^{(0)} + ...\right),\ \mu \to 0, \\ &\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{(\infty)} = \mu^{\lambda_\infty}\left(\hat{\mathbf{Y}}_1^{(\infty)} + \frac{1}{\mu}\hat{\mathbf{Y}}_2^{(\infty)} + \frac{1}{\mu^2}\hat{\mathbf{Y}}_3^{(\infty)} + ...\right), \\ &\mu \to \infty. \end{aligned} \tag{33}$$

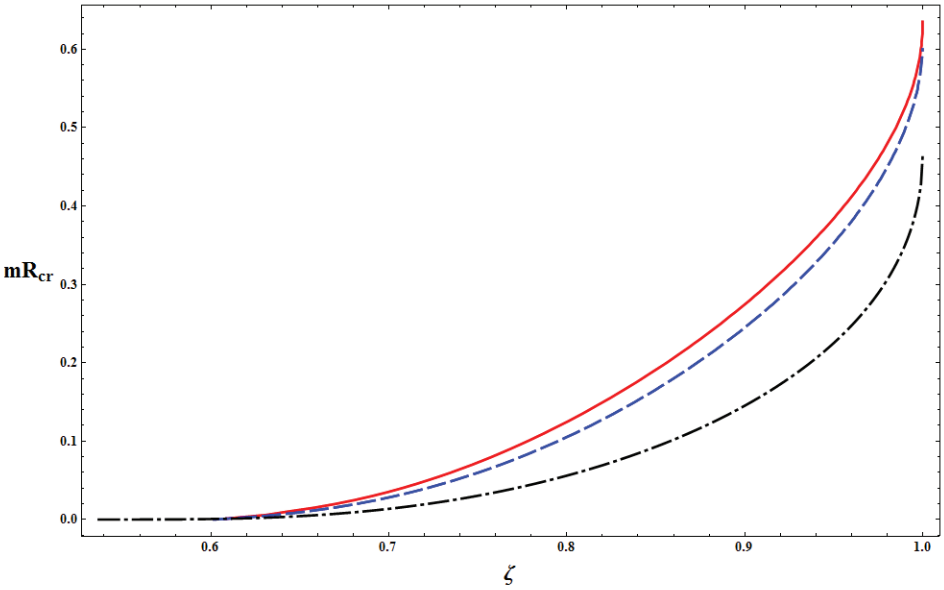


***Рис. 2.*** Залежність $mR_{\rm cr}(\zeta)$, отримана з чисельного розв'язку рівнянь (16) (штрихпунктирна лінія) та (35) (суцільна лінія), для порівняння наведено результати розрахунків у першому наближенні варіаційного методу з роботи [19] (шрихова лінія)

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

$$\hat{\mathbf{Y}}_1^2 - \hat{\mathbf{B}}_1\hat{\mathbf{Y}}_1 - \hat{\mathbf{A}}_1 = 0, \tag{34}$$

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

Таким чином, знаходять початкові умови на матрицю $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}$ в нулі та на нескінченності. Відповідні матриці наведені в Додатку B. Після цього відбувається чисельне інтегрування рівнянь Ріккаті методом Рунге-Кутти з урахуванням початкових умов в областях $\mu \in [0,1]$, $\mu \in [1, \infty)$. Обчислюються значення матриць $\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{S}}^{0/\infty}(\mu = 1)$. Потім необхідно здійснити обернені перетворення і знайти матриці $\hat{\mathbf{Y}}^{0/\infty}(\mu = 1)$. Умовою гладкого зшивання пробних функцій в областях $\mu > 1$ та $\mu < 1$ є:

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

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

## 4. Висновки

Було проведено дослідження надкритичної нестабільності в системі двох ідентичних заряджених домішок в графені. Заряд кожної з домішок є субкритичним, але їх сума $\zeta = 2Z\alpha/\kappa$ перевищує критичне значення $\zeta_c = 1/2$. Таким чином, для кожного фіксованого $\zeta$ існує така відстань між ними $R_{\rm cr}$, за якої настає надкритичний режим. Актуальність проведеного дослідження зумовлена нещодавніми спостереженнями надкритичної нестабільності в кластерах домішок Са, поміщених на графені [8].

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

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

Як показано в [19], ця надкритична нестабільність проявляється появою в нижньому континуумі квазістаціонарного стану. Він може бути спостережений в локальній густині станів (LDOS), яка є експериментально вимірюваною величиною. Але енергія та ширина резонансу спадають при віддаленні домішок одна від одної як $\frac{1}{R}$, а тому при досягненні деякої досить великої відстані резонанс стане непомітним (наприклад, через обмежену точність вимірювань). І тоді стан системи не можна буде відрізнити від субкритичного.

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

## ДОДАТОК А

### Вирази для матриць-коефіцієнтів

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

$$S[\psi] = 4\sum_{k,l=1}^{N}\int_0^\infty d\mu d\nu |J| \Bigg[ (\boldsymbol{\nabla}\mu)^2 \psi'_k \psi^{*\prime}_l \nu^{k+l-2} +$$

$$+ 2\boldsymbol{\nabla}\mu\boldsymbol{\nabla}\nu \Re e(\psi^*_l\psi'_k)(l-1)\nu^{k+l-3} -$$

$$-2\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}V}{2V}\times\boldsymbol{\nabla}\mu\right)\Im(\psi^*_l\psi'_k)\nu^{k+l-2} +$$

$$+\psi^*_l\psi_k\Bigg[(\boldsymbol{\nabla}\nu)^2(l-1)(k-1)\nu^{k+l-4} -$$

$$-i(l-k)\left(\frac{\boldsymbol{\nabla}V}{2V}\times\boldsymbol{\nabla}\nu\right)\nu^{k+l-3} +$$

$$+2U\nu^{k+l-2}\Bigg]\Bigg] f(\mu,\nu), \tag{A1}$$

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

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

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

$$f(\mu,\nu) = \theta(1-\mu\nu)\times$$

$$\times\left[\theta(1-\mu)\theta(\mu(\nu+1)-1)+\theta(\mu-1)\right]. \tag{A3}$$

Перепишемо в змінних $(\mu,\nu)$ всі величини, що фігурують у функціоналі (A1):

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

## ДОДАТОК B
### Особливості застосування варіаційного методу з $N = 2$

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

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

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

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

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

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

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

1. Інтервал $0 < \mu \leq 1$

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

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

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

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

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

Рівняння (34) зводиться до такого вигляду:

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

його розв'язок:

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

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

2. Інтервал $1 \leq \mu < \infty$

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

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

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

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

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

Розв'язок рівняння (34) має вигляд

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

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


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

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


Одержано 12.09.13

*А.А. Соболь*

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

Р е з ю м е

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

*O.O. Sobol*

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

S u m m a r y

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