

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»
(СПбГУ)

Кафедра статистической физики

Направление «Физика»



ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУРНЫХ ФУНКЦИЙ ГРИНА ГРАФЕНА В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ

Магистерская диссертация студента

_____ **И. А. Дьяконов**

Научный руководитель:

_____ к. ф.- м. н., доц. **М. В. Комарова**

Рецензент:

_____ д. ф.-м. н., проф. **М. Ю. Налимов**

Санкт-Петербург

2015

Содержание

1. Введение.	2
2. Гамильтониан, начальные условия	4
3. Граничные условия	6
4. Вычисление пропагатора	7
5. Профиль электронной плотности	9
6. Заключение	18
7. Приложение А	19

1. Введение.

Описание электронных свойств графена, начавшееся в 40-е годы работой [1], получило мощный толчок в связи с успешными экспериментами по исследованию зонной структуры [2] в 70-90х годах, и еще сильнее после открытия простого способа получения монослоя графена в 2004 году Геймом и Новоселовым [3].

Гамильтониан электронов в графене, записанный в коллективных переменных, соответствующих распространению волн в двух подрешётках Браве, разлагается в пространстве обратной решётки в окрестности точек, реализующих минимум энергии. При этом приближение, соответствующее квадратичному по полям гамильтониану, в точности реализует динамику двумерных свободных релятивистских безмассовых фермионов. Это обуславливает важность применения в данной задаче квантово-полевого формализма, поскольку он предоставляет готовый математический аппарат для исследования статистических свойств таких частиц.

Однако для построения последовательной теории возмущений в такой науке недостаточно переформулировать для неё известные квантово-полевые результаты, касающиеся ультра-релятивистских ферми-газов. Очевидное отличие размерности пространства, ограниченного для электронов в графене двумерием, приводит значительным техническим различиям [5]. Влияние одномерной границы двумерного графена в полупространстве также не сводится к известным квантово-полевым результатам – соответствующие эффекты также являются объектом современных исследований [6]. По этой причине последовательное описание электронных свойств графена с границей в рамках наиболее мощного теоретико-полевого формализма температурных функций Грина (тфГ) не осуществлено до сих пор.

Целью данной работы является построение пропагатора тфГ для графена в полупространстве. В рассмотренной задаче граница полупространства ориентирована под произвольным углом ϑ к выбранной оси симметрии решетки (см. рис.1.1). Случай $\vartheta = 0$ называют аценовый край ("зигзаг"), а $\vartheta = \pi/2$ – фенантреновый край ("кресло"). Наличие "кресла" связывают с образованием у края запрещенных зон, что вызывает аналитические сложности в рассмотрении данного случая в квантово-полевым формализме; рассмотрение этого случая часто проводят отдельно [6].

Явный учёт граничных условий приводит к зависимости построенного нами пропагато-

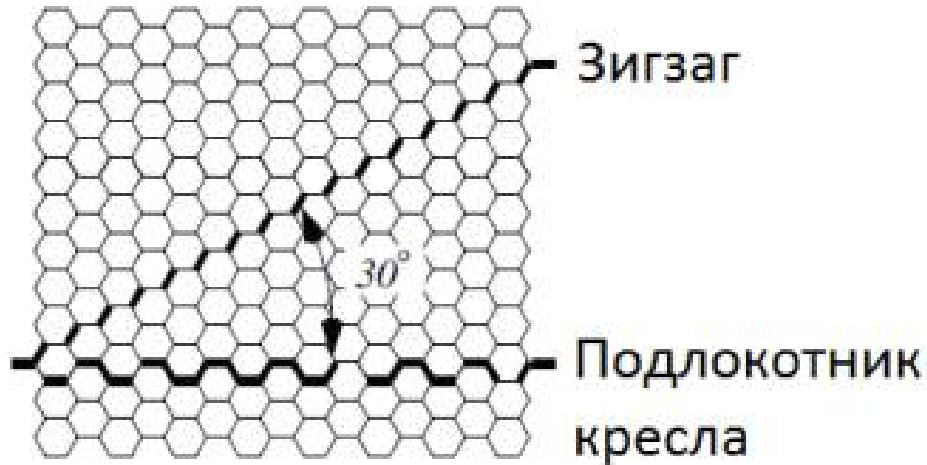


Рис. 1.1: Вид краев графена

ра от параметра ϑ . Поэтому полученные нами результаты проанализированы на предмет неаналитичности при $\vartheta = \pi/2$, обсуждается корректность использования построенного пропагатора в последовательном формализме тФГ при произвольных значениях ϑ .

Прямым способом получения физически значимых результатов с помощью пропагатора является вычисление с его помощью электронной плотности. Некоторые технические сложности, выражающиеся в наличии ультрафиолетовых (УФ-) расходимостей, связаны с корректным учетом сдвига дираковского "подвала" в термодинамической постановке задачи с введённым химическим потенциалом. Мы приводим подробный анализ появления этой расходимости и обсуждаем корректное обращение с ней на простом примере графена в полном пространстве, и обобщаем эти результаты на случай графена в полупространстве.

Во второй главе вводится гамильтониан рассматриваемой задачи, граничные условия, обсуждаются особенности формализма температурных функций Грина. В третьей главе вычисляется пропагатор этой модели. В четвертой главе вычисляется электронная плотность графена в полупространстве. В заключении обсуждаются полученные результаты. В конце статьи, в приложении, мы приводим расчет электронной плотности на основе пропагатора в отсутствие границ для иллюстрации механизма появления УФ-расходимостей.

2. Гамильтониан, начальные условия

Электронные свойства графена описываются комплексным полем $\psi = (\psi_1, \psi_2)$, имеющем две компоненты, которые соответствуют коллективным переменным, задающим динамику квазичастиц на двух подрешетках. Каждая компонента, в свою очередь, имеет спинорные индексы, соответствующие физическим фермионным свойствам соответствующих квазичастиц.

В данных переменных гамильтониан раскладывается в окрестности двух точек K_{\pm} (в двух "долинах"), лежащих в пространстве обратной решетки в зоне Брюллиэна; в этих точках гамильтониан реализует минимум. Разложение, соответствующее свободной от взаимодействия модели, имеет в точности вид гамильтониана двумерных релятивистских фермионов [1],[3], причём роль спинорного индекса релятивистских фермионов играет индекс, определяющий подрешетку:

$$H = \psi^\dagger (-iv_F(\sigma_2\partial_x \mp \sigma_1\partial_y)) \psi,$$

здесь $\psi = \psi(x, y, t)$, $\psi^\dagger \equiv \psi^{*T}$, индексы поля, связанные с подрешётками и физическими спинами подразумеваются, также как и интегрирование в гамильтониане по аргументам и индексам. Величина v_F – скорость Ферми, σ_0 – единичная матрица, σ_1, σ_2 – матрицы Паули. Знаки \pm соответствуют разложению гамильтониана в точках K_{\pm} .

Для описания равновесной системы таких частиц при температуре T в рамках формализма температурных функций Грина [4] осуществляется переход к "мнимому времени", которое затем полагается изменяющим в интервале $\tau \in (0, \beta)$, где $\beta = 1/kT$ – обратная больцмановская температура. Тогда уравнение на квантово-механическую функцию Грина

$$(i\hbar\partial_t - \hat{H})G = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(t - t')$$

перепишется в виде

$$-(\partial_\tau + (\hat{H} - \mu))G = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(\tau - \tau'),$$

Стоит отметить, что знак перед ∂_τ выбирается из того факта, что мы хотим получить причинную функцию Грина, в противном случае полюса функции Грина будут располагаться иначе и мы получим "антипричинный" пропагатор, то есть дырки будут иметь положитель-

ную энергию, а электроны - отрицательную. При этом гамильтониан \hat{H} останется таким же, как в квантовой механике. μ - химпотенциал системы, отсчитываемый от уровня Ферми. В итоге мы приходим к уравнению

$$-((\partial_\tau - \mu)\sigma_0 - iv_F(\sigma_2\partial_x \mp \sigma_1\partial_y))G = \delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta(\tau - \tau') \quad (2.1)$$

На поля накладываются антипериодические начальные условия, соответствующие решениям фермионного типа

$$\psi(x, y, 0) = -\psi(x, y, \beta)$$

что в терминах мацубаровских частот означает, что ψ представляется в виде Фурье ряда по частотам $\frac{\pi}{\beta}(2n + 1)$ (n - целое):

$$\psi(x, y, \tau) = \sum_{\omega_n} e^{-i\omega_n\tau} \psi(x, y, \omega_n), \quad \omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1).$$

В рамках большого канонического ансамбля вводится химический потенциал системы μ .

3. Граничные условия

Граничные условия на поля в полупространстве физически определяются условием обращения в ноль полного тока, текущего через границу, и симметричными соображениями. Соответствующее условие имеет вид [6]

$$(\sigma_0 + \sigma_1 e^{-i\sigma_2 \vartheta}) \psi(x, y, t) \Big|_{x=0} = 0, \quad (3.1)$$

Стоит отметить, что параметр ϑ не является углом разреза плоскости графена, а показывает лишь степень нарушения электронно-дырочной симметрии. Заметим, что $\vartheta = 0$ соответствует границе типа "зигзаг", а $\vartheta = \frac{\pi}{2}$ соответствует границе с бесконечной массой квазичастиц.

В статье [6] имеется полезная формула для вычисления угла ϑ :

$$\cos \vartheta = \frac{1 + \operatorname{sh}(\kappa) \operatorname{sh}(2N \frac{V}{t} + \kappa)}{\operatorname{ch}(\kappa) \operatorname{ch}(2N \frac{V}{t} + \kappa)}, \quad (3.2)$$

где $\kappa = \operatorname{sh}(\frac{V}{2t})$, $V = V_A = -V_B$ - электростатический потенциал на подрешеток; t - интеграл перекрытия; N - номер единичной ячейки, отсчитанный от границы. Видно, что при $N = 0$ и $N \gg 1$ $\vartheta = 0$, то есть на границе и вдали от границы ϑ имеет одно и то же значение, соответствующее границе типа "зигзаг".

Также в системе полагается затухание полей на больших расстояниях от границы (при $x \rightarrow \infty$) - соответствующее поведение обеспечивается переходом от плоских волн в квантовой механике к мнимому времени формализма тфГ. Граничное условие и условие затухания фиксируют функциональное пространство, описывающее рассматриваемую модель.

4. Вычисление пропагатора

Для удобства мы перейдём в систему координат, в которой v_F обращается в единицу; в физических ответах мы восстановим зависимость от v_F по размерности. Уравнение на пропагатор тфГ имеет вид

$$-((\partial_\tau - \mu)\sigma_0 - i(\sigma_2\partial_x \mp \sigma_1\partial_y))G(\tau, x, y, \tau', x', y') = \delta(\tau - \tau')\delta(x - x')\delta(y - y').$$

Оно должно быть дополнено условием на границе $x = 0$, идентичным (3.1), и условием затухания пропагатора при удалении от границы, так как функциональное пространство, которому принадлежит пропагатор, определяется пространством полей ψ .

При помощи несложных преобразований несложно убедиться, что из (3.1) следует, что G на границе представляется в виде

$$G\Big|_{x=0} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \varsigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}, \quad \varsigma = -\frac{1 + \sin \vartheta}{\cos \vartheta}, \quad \exists A_1, A_2 \quad (4.1)$$

Фурье-преобразование по $y - y'$ и $-(\tau - \tau')$ приводит к выражению

$$(\sigma_0(i\omega_n + \mu) + i\sigma_2\partial_x \pm \sigma_1p_y)G = \delta(x - x'). \quad (4.2)$$

Общее решение фундаментального уравнения (4.2) имеет вид

$$G = G_1\theta(x - x') + G_2,$$

где $G_{1,2}$ удовлетворяют однородному уравнению, соответствующему (4.2), с отброшенной правой частью. Несложно найти

$$G_i = \tilde{G} \begin{pmatrix} B_{i1} & 0 \\ 0 & B_{i2} \end{pmatrix} e^{\varkappa(x-x')} + \sigma_1 \tilde{G} \sigma_1 \begin{pmatrix} B_{i3} & 0 \\ 0 & B_{i4} \end{pmatrix} e^{-\varkappa(x-x')},$$

$$\tilde{G} = \begin{pmatrix} \frac{-\varkappa \mp p_y}{i\omega_n + \mu} & 1 \\ 1 & \frac{\varkappa \mp p_y}{i\omega_n + \mu} \end{pmatrix} = \frac{\mp p_y \sigma_0 - \varkappa \sigma_3}{i\omega_n + \mu} + \sigma_1, \quad \varkappa = \sqrt{p_y^2 - (i\omega_n + \mu)^2}.$$

Параметры B_{ij} являются константами интегрирования; для их определения необходимо обратиться к граничному условию (4.1) условию убывания G на бесконечности. Это приводит к выражению

$$G = -\frac{1}{1-\gamma} \left(\theta(x-x') (\tilde{G}\Gamma e^{-\varkappa(x-x')} - \sigma_1 \tilde{G}\Gamma \sigma_1 e^{\varkappa(x-x')}) + \sigma_1 \tilde{G}\Gamma \sigma_1 e^{\varkappa(x-x')} - \tilde{G}\Delta_M \sigma_1 \Gamma \sigma_1 e^{-\varkappa(x+x')} \right) \quad (4.3)$$

Здесь для удобства были введены следующие обозначения:

$$\Gamma = \begin{pmatrix} \gamma & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{\gamma+1}{2} \sigma_0 + \frac{\gamma-1}{2} \sigma_3, \quad \gamma = \frac{\mp p_y + \varkappa}{\mp p_y - \varkappa},$$

$$\Delta_M = \begin{pmatrix} \Delta_1 & 0 \\ 0 & \Delta_2 \end{pmatrix},$$

$$\Delta_1 = \frac{i\omega_n + \mu - \varsigma(\mp p_y + \varkappa)}{i\omega_n + \mu - \varsigma(\mp p_y - \varkappa)}, \quad \Delta_2 = \frac{\mp p_y - \varkappa - \varsigma(i\omega_n + \mu)}{\mp p_y + \varkappa - \varsigma(i\omega_n + \mu)}.$$

5. Профиль электронной плотности

Используя функцию Грина найдем профиль электронной плотности

$$n(x) = \frac{1}{\beta} \sum_{valleys} \sum_{\omega_n} \int \frac{dp_y}{2\pi} TrG(x, x) = \frac{g_s}{\beta} \sum_{valleys} \sum_{\omega_n} \int \frac{dp_y}{2\pi} \left(\frac{i\omega_n + \mu}{\varkappa} - e^{-2\varkappa x} \frac{\Delta_1(\mp p_y - \varkappa)^2 + \Delta_2(\mp p_y + \varkappa)^2}{2\varkappa(i\omega_n + \mu)} \right) \quad (5.1)$$

где $g_s = 2$ - спиновое вырождение. В дальнейшем g_s всюду заменено на 2. В (5.1) первая сумма берется по разным долинам, вторая сумма - по мацубаровским частотам $\omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n+1)$. Удобно перейти от суммы к интегральному представлению - сумме по полюсам вдоль мнимой оси. Тогда:

$$n(x) = \frac{2}{2\pi i \beta} \sum_{valleys} \oint \frac{\beta dp_0}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \int \frac{dp_y}{2\pi} \left(\frac{p_0 + \mu}{\varkappa} - e^{-2\varkappa x} \frac{\Delta_1(\mp p_y - \varkappa)^2 + \Delta_2(\mp p_y + \varkappa)^2}{2\varkappa(p_0 + \mu)} \right) \quad (5.2)$$

Прежде, чем приступить к расчетам интеграла, следует упростить подынтегральную функцию (второе слагаемое):

$$\sum_{valleys} \frac{\Delta_1(\mp p_y - \varkappa)^2 + \Delta_2(\mp p_y + \varkappa)^2}{2\varkappa(p_0 + \mu)} = \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu - \frac{2}{\varsigma - \varsigma^{-1}}\varkappa)} \quad (5.3)$$

Стоит отметить, что $\text{th} \left(\frac{p_0}{2T} \right)$ хоть и имеет полюса в нужных местах, на бесконечности не убывает и интеграл остается расходящимся, тем не менее, подынтегральная функция аналитична во всей плоскости, кроме разреза и полюсов на мнимой оси и еще одного дополнительного полюса на вещественной оси, связанного с множителем в знаменателе $p_0 + \mu - \frac{2}{\varsigma - \varsigma^{-1}}\varkappa$. Из-за этого контур интегрирования можно продеформировать и перейти к интегрированию по разрезу, как показано на рисунке 5.1.

$$\frac{2}{\varsigma - \varsigma^{-1}} = \frac{2}{-\frac{1+\sin \vartheta}{\cos \vartheta} + \frac{\cos \vartheta}{1+\sin \vartheta}} = \frac{2 \cos \vartheta (1 + \sin \vartheta)}{\cos^2 \vartheta - (1 + \sin \vartheta)^2} = \frac{2 \cos \vartheta (1 + \sin \vartheta)}{1 - \sin^2 \vartheta - (1 + \sin \vartheta)^2} = -\frac{\cos \vartheta}{\sin \vartheta} = -\text{ctg} \vartheta \quad (5.4)$$

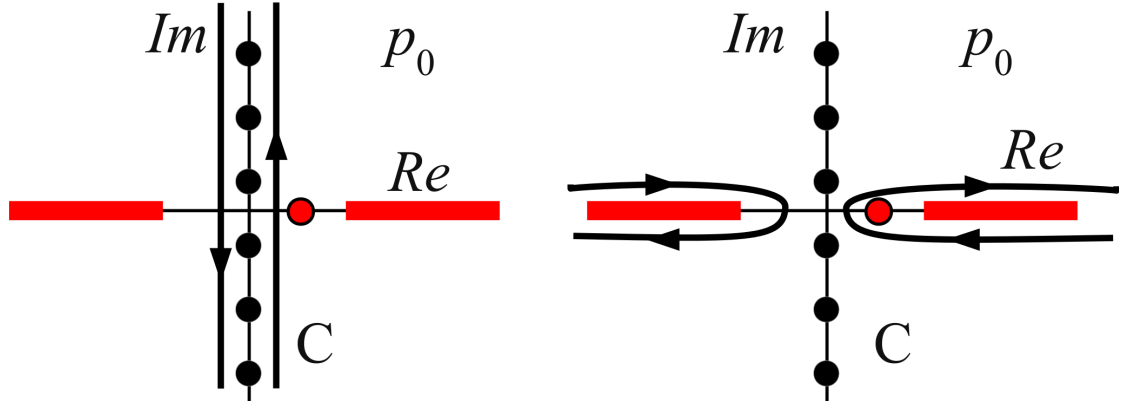


Рис. 5.1: Изменение контура интегрирования.

Из (5.1), (5.2), (5.3), (5.4) получаем:

$$n(x) = n_{0+} - n_+(x) + n_{0-} - n_-(x) - n_p(x) \quad (5.5)$$

$$n_{0+} = 4 \frac{1}{2\pi i \beta} \oint_{\gamma_+} \frac{\beta dp_0}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \int \frac{dp_y}{2\pi} \frac{p_0 + \mu}{\varkappa} \quad (5.6)$$

$$n_{0-} = 4 \frac{1}{2\pi i \beta} \oint_{\gamma_-} \frac{\beta dp_0}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \int \frac{dp_y}{2\pi} \frac{p_0 + \mu}{\varkappa} \quad (5.7)$$

$$n_+(x) = \frac{2}{2\pi i \beta} \oint_{\gamma_+} \frac{\beta dp_0}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \int \frac{dp_y}{2\pi} \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu + \varkappa \text{ctg} \vartheta)} e^{-2\varkappa x} \quad (5.8)$$

$$n_-(x) = \frac{2}{2\pi i \beta} \oint_{\gamma_-} \frac{\beta dp_0}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \int \frac{dp_y}{2\pi} \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu + \varkappa \text{ctg} \vartheta)} e^{-2\varkappa x} \quad (5.9)$$

$$n_p(x) = 2 \int \frac{dp_y}{2\pi \beta} \underset{|p_0 + \mu| = |p_y| \cos \theta}{\text{res}} \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu + \varkappa \text{ctg} \vartheta)} e^{-2\varkappa x} \frac{\beta}{2} \text{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) \quad (5.10)$$

В формулах (5.6), (5.8) и (5.7), (5.9) интегрирование ведется по правому и левому разрезу соответственно. Знак плюс в формулах соответствует частицам с положительной энергией (электронам), минус - с отрицательной энергией (дыркам).

Вернемся к доопределению интегралов (5.6)-(5.9). Мы выбирали функцию $\text{th}(\frac{\beta p_0}{2})$ как имеющую полюса в точках мацубаровских частот и одинаковые вычеты в них, а также аналитичную во всей остальной комплексной плоскости. Тем не менее, подынтегральная функция на бесконечности стремится к константе и дает линейную УФ-расходимость как в случае частиц, так и античастиц. Физически это означает, что интегралы в таком виде учитывают также частицы и античастицы, находящиеся в "пропасти Дирака". Чтобы вы-

честь эти "фоновые частицы вычтем единицу из $\text{th}(\frac{\beta p_0}{2})$ в случае интегралов по правому разрезу, и прибавим - в случае интегралов по левому разрезу и разделим всё на 2, так как $(\text{th}(\frac{\beta p_0}{2}) + 1)/2 + (\text{th}(\frac{\beta p_0}{2}) - 1)/2 = \text{th}(\frac{\beta p_0}{2})$. Нетрудно показать, что в этом случае $\text{th}(\frac{p_0}{2T})$ заменится на $\mp \frac{2}{e^{\pm \beta p_0} + 1}$, что и даст нам требуемое затухание и соответствие с теорией Ферми-жидкостей.

Заметим, что интегралы (5.6), (5.8) и (5.7), (5.9) различаются только знаком перед интегралом и перед химпотенциалом. Следовательно, достаточно вычислить только (5.6), (5.8), при этом (5.7), (5.9) будут автоматически известны. Из (5.6) получим:

$$\begin{aligned}
n_{0+} &= \frac{4}{4\pi^2 i} \int dp_y \oint_{\gamma_+} dp_0 \frac{1}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{p_0 + \mu}{\varkappa} = \\
&= \frac{1}{\pi^2 i} \int dp_y \int_{|p_y| - \mu}^{\infty} dp_0 \frac{2}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{p_0 + \mu}{i \sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2}} = \\
&= -\frac{2}{\pi^2} \int dp_y \int_{|p_y|}^{\infty} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_0}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}} \tag{5.11}
\end{aligned}$$

Замечая, что второй интеграл четен по p_y и переставляя интегралы получаем

$$\begin{aligned}
n_{0+} &= -\frac{4}{\pi^2} \int_0^{\infty} dp_0 \frac{p_0}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \int_0^{p_0} dp_y \frac{1}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}} = [y = \frac{p_y}{p_0}] \\
&= -\frac{4}{\pi^2} \frac{1}{\beta^2} I_1(\beta\mu) \int_0^1 \frac{dy}{\sqrt{1 - y^2}} = -\frac{2}{\pi\beta^2} I_1(\beta\mu) \tag{5.12}
\end{aligned}$$

Из формулы (5.12) следует, что электронная плотность в графене вдали от границы равна

$$n_{0+} = -\frac{2}{\pi\beta^2} I_1(\beta\mu),$$

Аналогично получаем дырочную плотность, учитывая, что интегрировать необходимо не до бесконечности, а до уровня Ферми:

$$n_{0-} = \frac{2}{\pi\beta^2} \int_0^{\beta(E_F - \mu)} \frac{z dz}{e^{z + \beta\mu} + 1}$$

Перейдем к рассмотрению поправки $n_+(x)$:

$$\begin{aligned}
n_+(x) &= \frac{2}{2\pi i\beta} \int \frac{dp_y}{2\pi} \oint_{\gamma_+} \frac{\beta dp_0}{2} \frac{1}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu + \varkappa \text{ctg } \vartheta)} e^{-2zx} = \\
&= \frac{1}{2\pi^2 i} \int dp_y \oint_{\gamma_+} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_y^2}{i\sqrt{p_0^2 - p_y^2}(p_0 + i\sqrt{p_0^2 - p_y^2} \text{ctg } \vartheta)} e^{-2i\sqrt{p_0^2 - p_y^2}x} = \\
&= -\frac{1}{2\pi^2} \int dp_y \oint_{\gamma_+} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_y^2}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}(p_0 + i\sqrt{p_0^2 - p_y^2} \text{ctg } \vartheta)} e^{-2i\sqrt{p_0^2 - p_y^2}x} \quad (5.13)
\end{aligned}$$

Здесь для краткости был рассмотрен только верхний край разреза. Для того, чтобы написать вклад от нижнего края, необходимо заменить знаки перед $\sqrt{p_0^2 - p_y^2}$ и переставить пределы интегрирования. Оба вклада вместе:

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2\pi^2} \int dp_y \int_{|p_y|}^{\infty} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_y^2}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}} \left(\frac{e^{-2i\sqrt{p_0^2 - p_y^2}x}}{p_0 + i\sqrt{p_0^2 - p_y^2} \text{ctg } \vartheta} + \frac{e^{2i\sqrt{p_0^2 - p_y^2}x}}{p_0 - i\sqrt{p_0^2 - p_y^2} \text{ctg } \vartheta} \right) = \\
& -\frac{1}{2\pi^2} \int dp_y \int_{|p_y|}^{\infty} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_y^2}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}} \left(\frac{2p_0 \cos(2x\sqrt{p_0^2 - p_y^2}) - 2\sqrt{p_0^2 - p_y^2} \sin(2x\sqrt{p_0^2 - p_y^2}) \text{ctg } \vartheta}{\frac{p_0^2}{\sin^2 \vartheta} - p_y^2 \text{ctg }^2 \vartheta} \right) = \\
& -\frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2} \int_0^{\infty} dp_y \int_{p_y}^{\infty} dp_0 \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{p_y^2}{\sqrt{p_0^2 - p_y^2}} \left(\frac{p_0 \cos(2x\sqrt{p_0^2 - p_y^2}) - \sqrt{p_0^2 - p_y^2} \sin(2x\sqrt{p_0^2 - p_y^2}) \text{ctg } \vartheta}{p_0^2 - p_y^2 \cos^2 \vartheta} \right) = \\
& -\frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2} \int_0^{\infty} dp_0 \int_0^1 dz \frac{p_0}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \frac{z^2}{\sqrt{1 - z^2}} \left(\frac{\cos(2xp_0\sqrt{1 - z^2}) - \sqrt{1 - z^2} \sin(2xp_0\sqrt{1 - z^2}) \text{ctg } \vartheta}{1 - z^2 \cos^2 \vartheta} \right) = \\
& -\frac{\sin^2 \vartheta}{\beta^2 \pi^2} \int_0^{\infty} \frac{s ds}{e^{s - \beta\mu} + 1} \int_0^1 dz \frac{z^2}{1 - z^2 \cos^2 \vartheta} \left(\frac{\cos(\frac{2xs}{\beta} \sqrt{1 - z^2})}{\sqrt{1 - z^2}} - \sin(\frac{2xs}{\beta} \sqrt{1 - z^2}) \text{ctg } \vartheta \right)
\end{aligned}$$

Рассмотрим интеграл

$$I(y, \theta) = \int_0^1 dz \frac{z^2}{1 - z^2 \cos^2 \vartheta} \frac{\cos(y\sqrt{1 - z^2})}{\sqrt{1 - z^2}} \quad (5.14)$$

Очевидно, что при помощи такой замены формула (5.13) преобразуется к виду

$$\begin{aligned}
n_+(x) &= -\frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2 \beta^2} \int_0^\infty \frac{s ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} \left(I\left(\frac{2xs}{\beta}, \theta\right) + \operatorname{ctg} \vartheta \frac{\partial I}{\partial y} \Big|_{y=\frac{2xs}{\beta}} \right) = \\
&= -\frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2 \beta^2} \int_0^\infty \frac{s ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} \left(I\left(\frac{2xs}{\beta}, \theta\right) + \frac{\beta \operatorname{ctg} \vartheta}{2x} \frac{\partial I}{\partial s} \right)
\end{aligned} \tag{5.15}$$

Исходя уже из самого вида формулы (5.15) видно, что координата и температура встречаются вместе. Отсюда следует, что чем выше температура, тем меньше система ощущает границы. Исходя из того, что дырки и электроны изначально в систему входят симметричным образом, то по аналогии с (5.15) для дырок получаем:

$$n_-(x) = \frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2 \beta^2} \int_0^{\beta(E_F - \mu)} \frac{ds}{e^{s+\beta\mu} + 1} \left(I\left(\frac{2xs}{\beta}, \vartheta\right) + \frac{\beta \operatorname{ctg} \vartheta}{2x} \frac{\partial I}{\partial s} \right) \tag{5.16}$$

Перейдем к рассмотрению граничных состояний. Нетрудно показать, что вычит в формуле (5.10) не зависит от знака ϑ , хотя положение полюса смещается. Если полюс смещается в сторону положительных энергий, то гиперболический тангенс необходимо заменить на $-\frac{1}{e^{\beta p_0} + 1}$, если в сторону отрицательных - на $\frac{1}{e^{-\beta p_0} + 1}$. Прежде всего заметим, что если $|p_0 + \mu| = |p_y| \cos \vartheta$, то $\varkappa = |p_y| |\sin \vartheta|$, а функция $p_0 + \mu + \varkappa \operatorname{ctg} \vartheta$ в окрестности этой точки ведет себя как $\frac{\delta p_0}{\sin^2 \vartheta}$. Следовательно,

$$\begin{aligned}
n_p(x) &= \int \frac{dp_y}{\pi \beta} \operatorname{res}_{|p_0 + \mu| = |p_y| \cos \vartheta} \frac{2p_y^2}{\varkappa(p_0 + \mu + \varkappa \operatorname{ctg} \vartheta)} e^{-2\varkappa x} \frac{\beta}{2} \operatorname{th} \left(\frac{\beta p_0}{2} \right) = \\
&= \frac{1}{\pi} \int dp_y \frac{|p_y| \sin \theta e^{-2|p_y|x|\sin \theta}}{e^{\beta(|p_y| \cos \theta + \mu \operatorname{sign} \theta)} + 1} = [\eta = \beta p_y \cos \vartheta] = \\
&= \frac{\sin \vartheta}{\pi \beta^2 \cos^2 \vartheta} \int_0^\infty d\eta \frac{\eta e^{-\frac{2x|\operatorname{tg} \vartheta|\eta}{\beta}}}{e^{\eta + \beta \mu \operatorname{sign} \vartheta} + 1}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Полный ответ с восстановленной размерностью представлен ниже:

$$n(x) = n_{0+} - n_+(x) + n_{0-} - n_-(x) - n_p(x) \quad (5.18)$$

$$n_{0+} = -\frac{2}{\pi} \left(\frac{kT}{\hbar v_F} \right)^2 I_1 \left(\frac{\mu}{kT} \right) \quad (5.19)$$

$$n_{0-} = \frac{2}{\pi} \left(\frac{kT}{\hbar v_F} \right)^2 \int_0^{\frac{E_F - \mu}{kT}} \frac{z dz}{e^{z + \frac{\mu}{kT}} + 1} \quad (5.20)$$

$$n_+(x) = -\left(\frac{kT}{\hbar v_F} \right)^2 \frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2} \int_0^\infty \frac{ds}{e^{s - \frac{\mu}{kT}} + 1} \left(I \left(\frac{2xkT}{\hbar v_F} \cdot s, \vartheta \right) + \frac{\hbar v_F \text{ctg} \vartheta}{2xkT} \frac{\partial I}{\partial s} \right) \quad (5.21)$$

$$n_-(x) = \left(\frac{kT}{\hbar v_F} \right)^2 \frac{\sin^2 \vartheta}{\pi^2} \int_0^{\frac{E_F - \mu}{kT}} \frac{ds}{e^{s + \frac{\mu}{kT}} + 1} \left(I \left(\frac{2xkT}{\hbar v_F} \cdot s, \vartheta \right) + \frac{\hbar v_F \text{ctg} \vartheta}{2xkT} \frac{\partial I}{\partial s} \right) \quad (5.22)$$

$$n_p(x) = \left(\frac{kT}{\hbar v_F} \right)^2 \frac{\sin \vartheta}{\pi \cos^2 \vartheta} \int_0^\infty d\eta \frac{\eta e^{-\frac{2xkT}{\hbar v_F} |\text{tg} \vartheta| \eta}}{e^{\eta + \frac{\mu \text{sign} \vartheta}{kT}} + 1} \quad (5.23)$$

$$I(y, \vartheta) = \int_0^1 dz \frac{z^2}{1 - z^2 \cos^2 \vartheta} \frac{\cos(y \sqrt{1 - z^2})}{\sqrt{1 - z^2}} \quad (5.24)$$

Условие электронейтральности системы выглядит как:

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty n(x) dx = 0 \\ & \int_0^\infty (n_{0+} + n_{0-} - n_+(x) - n_-(x) - n_p(x)) dx = \\ & \int_0^\infty (n_{0+} + n_{0-} - n_+(x) - n_-(x)) dx - \int_0^\infty n_p(x) dx = \\ & \int_0^\infty (n_{0+} + n_{0-} - n_+(x) - n_-(x)) dx - \frac{2 \text{sign} \vartheta}{\beta \cos \vartheta} I_0(\beta \mu \text{sign} \vartheta) \end{aligned} \quad (5.25)$$

Здесь для удобства размерность не была восстановлена.

Предположим, что вклад вида $\int_0^\infty (n_+(x) + n_-(x)) dx$ конечен. Чтобы его вычислить необходимо как-то регуляризовать подынтегральные функции, например, вставить единицу в виде $\lim_{\varepsilon \rightarrow 0+} e^{-\varepsilon x}$, так как переставить интегралы $\int_0^\infty dx$ и $\int_0^\infty ds$ нельзя в силу того, что $\int_0^\infty \cos\left(\frac{2x}{\beta} \sqrt{1 - z^2}\right) dx$ не определен. Тогда имеем 2 ограничения на зарядовую плотность:

- $\int_0^{\infty} (n_{0+} + n_{0-}) dx = 0$, если $n_{0+} + n_{0-} = 0$, в противном случае этот вклад обращается в бесконечность, так как эти вклады от координаты не зависят.
- Оставшиеся 3 вклада должны также занулиться. После взятия интегралов получаем следующее условие:

$$I_0(\beta\mu) = \int_0^{\beta(E_F - \mu)} \frac{ds}{e^{s+\beta\mu} + 1} + \frac{4\pi^3}{f(\vartheta) \sin^2 \vartheta \cos \vartheta} I_0(\beta\mu \text{sign} \vartheta) \quad (5.26)$$

$$f(\vartheta) = \int_0^1 \frac{z^2 dz}{(1 - z^2 \cos^2 \vartheta) \sqrt{1 - z^2}}$$

Из первого условия можем найти зависимость химпотенциала от температуры, а из второго - найти такие значения параметра ϑ , которые удовлетворяют условию электронейтральности. Упростим $f(\vartheta)$:

$$f(\vartheta) = \frac{1}{4} \int_0^{2\pi} \frac{\sin^2 \varphi d\varphi}{1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \vartheta} = -\frac{1}{4 \cos^2 \vartheta} \left(2\pi - \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{1 - \sin^2 \varphi \cos^2 \vartheta} \right) = \quad (5.27)$$

$$-\frac{1}{8 \cos^2 \vartheta} \left(4\pi - \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{1 - \sin \varphi \cos \vartheta} - \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{1 + \sin \varphi \cos \vartheta} \right) = \quad (5.28)$$

$$-\frac{\pi}{2 \cos^2 \vartheta} \left(1 - \frac{1}{|\sin \vartheta|} \right) => \quad (5.29)$$

$$\frac{4\pi^3}{f(\vartheta) \sin^2 \vartheta \cos \vartheta} = -\frac{8\pi^2 \cos \vartheta}{\sin^2 \vartheta - |\sin \vartheta|} > 250 \quad (5.30)$$

Из неравенства (5.30) можем сделать вывод, что уравнение (5.26) не может быть выполнено. Также видно, что при $\vartheta = 0$, $\vartheta = \pm \frac{\pi}{2}$ функция стремится к бесконечности. Это означает, что разрешенными параметрами ϑ являются только $\vartheta = 0$, $\vartheta = \pm \frac{\pi}{2}$ и необходимо заново пересмотреть значение интеграла (5.25), но уже только в трех предельных случаях, либо придется отказаться от условия электронейтральности в случае других значений параметра ϑ . Ниже приведен ее график:

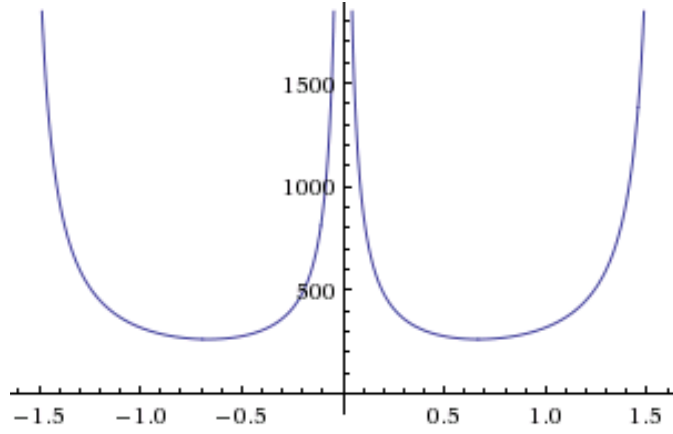


Рис. 5.2: График функции $-\frac{8\pi^2 \cos \vartheta}{\sin^2 \vartheta - |\sin \vartheta|}$

Перейдем к предельному случаю $\vartheta = \frac{\pi}{2}$.

$$I(y, \frac{\pi}{2}) = -\frac{1}{y} \int_0^1 z d \sin(y\sqrt{1-z^2}) = \frac{1}{y} \int_0^1 \sin(y\sqrt{1-z^2}) dz = \frac{\pi}{2} \frac{J_1(y)}{y} \quad (5.31)$$

$$n_+(x) = \frac{1}{\pi^2 \beta^2} \int_0^\infty \frac{ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} I(\frac{2xs}{\beta}, \frac{\pi}{2}) = \frac{1}{8\pi x \beta} \int_0^\infty \frac{ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} \frac{J_1(\frac{2xs}{\beta})}{s} \quad (5.32)$$

$$n_-(x) = \frac{1}{\pi^2 \beta^2} \int_0^{\beta(E_F-\mu)} \frac{ds}{e^{s+\beta\mu} + 1} I(\frac{2xs}{\beta}, \frac{\pi}{2}) = -\frac{1}{8\pi \beta x} \int_0^{\beta(E_F-\mu)} \frac{ds}{e^{s+\beta\mu} + 1} \frac{J_1(\frac{2xs}{\beta})}{s} \quad (5.33)$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty (n_+(x) + n_-(x)) dx &= \frac{1}{2\pi\beta} \left(\int_0^\infty ds \frac{1}{e^{s-\beta\mu} + 1} - \int_0^{\beta(E_F-\mu)} ds \frac{1}{e^{s+\beta\mu} + 1} \right) \int_0^\infty \frac{J_1(\frac{2xs}{\beta})}{2xs} dx = \\ &= \frac{1}{4\pi\beta} \left(\int_0^\infty \frac{ds}{s} \frac{1}{e^{s-\beta\mu} + 1} - \int_0^{\beta(E_F-\mu)} \frac{ds}{s} \frac{1}{e^{s+\beta\mu} + 1} \right) \end{aligned} \quad (5.34)$$

Видно, что если $\mu \neq 0$, то этот вклад бесконечен. Вклад от n_p также оказывается бесконечным:

$$\int_0^\infty n_p(x) dx = \frac{2}{\beta} I_0(\beta\mu) \lim_{\vartheta \rightarrow \frac{\pi}{2}} \frac{1}{\cos \vartheta} = \frac{2}{\beta} I_0(\beta\mu) \frac{1}{\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0+ \quad (5.35)$$

Получается, что имеется в теории один свободный малый параметр $\varepsilon = \frac{\pi}{2} - \vartheta$, при помощи которого уравнение (5.25) всегда можно выполнить. Следовательно, для поиска зависимости $\mu(\theta, T)$ необходим способ регуляризации суммы интегралов такого вида.

При $\vartheta \rightarrow 0$ вклад n_p стремится к нулю. Рассмотрим интегралы (5.21), (5.22), (5.24). Очевидно, что подынтегральная функция при $\vartheta = 0$ становится неинтегрируемой и необходимо рассматривать ее асимптотику. Главный вклад в нее дает точка $z = 1$.

$$n_+(x) = -\frac{1}{\pi^2 \beta^2} \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \sin^2 \vartheta \int_0^{\infty} \frac{ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} I\left(\frac{2xs}{\beta}, \vartheta\right) \quad (5.36)$$

$$n_-(x) = \frac{1}{\pi^2 \beta^2} \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \sin^2 \vartheta \int_0^{\beta(E_F - \mu)} \frac{ds}{e^{s+\beta\mu} + 1} I\left(\frac{2xs}{\beta}, \vartheta\right) \quad (5.37)$$

$$\begin{aligned} I(y, 0) &= \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 dz \frac{z^2}{1 - z^2 \cos^2 \vartheta} \frac{\cos(y\sqrt{1-z^2})}{\sqrt{1-z^2}} = \\ \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 dz \frac{z^2}{(1 - z \cos \vartheta)(1 + z \cos \vartheta)} \frac{1}{\sqrt{(1-z)(1+z)}} &= \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{z^2}{1 - z \cos \vartheta} \frac{dz}{2\sqrt{2}\sqrt{1-z}} = \\ [w^2 = 1 - z] &= \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{(1-w^2)^2}{1 - (1-w^2) \cos \vartheta} \frac{dw}{\sqrt{2}} = \\ \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{(1-w^2)^2}{(1 - \cos \vartheta) + w^2} \frac{dw}{\sqrt{2}} &\leq \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \int_0^1 \frac{dw}{\frac{\vartheta^2}{2} + w^2} \sim O\left(\frac{1}{\vartheta}\right) \end{aligned} \quad (5.38)$$

Из оценки интеграла (5.38) следует, что

$$n_+(x) = -\frac{1}{\pi^2 \beta^2} \int_0^{\infty} \frac{ds}{e^{s-\beta\mu} + 1} \lim_{\vartheta \rightarrow 0} \sin^2 \vartheta I\left(\frac{2xs}{\beta}, \vartheta\right) = 0 \quad (5.39)$$

$$n_-(x) = 0 \quad (5.40)$$

То есть при $\vartheta = 0$ квазичастицы в графене границы не ощущают.

6. Заключение

В ходе данной работы было получено точное выражение для тфГ полуплоскости графена (4.3). Полученная тфГ может быть использована для построения регулярной теории возмущений для описания электронных свойств графена, связанных с взаимодействием типа "плотность-плотность". С ее помощью была вычислена зарядовая плотность в общем случае для произвольного угла ϑ (5.18-5.24). Оказалось, что условие электронейтральности не нарушается только в трех случаях: при $\vartheta = 0, \vartheta = \pm\frac{\pi}{2}$. Первый соответствует граничным условиям типа "зигзаг", оставшиеся два - типа "кресло", причем в первом случае электронная плотность не зависит от расстояния до границы и возможно восстановить зависимость химпотенциала от температуры и уровня Ферми, а во втором случае зависимость химпотенциала от температуры установить не удалось. Это связано в первую очередь с нарушением электронно-дырочной симметрии посредством введения в рассмотрение ненулевого химпотенциала.

7. Приложение А

В формулах (5.13), (5.12) использовался подход, аналогичный описанному в статье [7]. Главное отличие от рассмотренного в [7] в присутствии разрезов на комплексной плоскости и постоянства на бесконечности функции. Стоит проверить работоспособность мат.аппарата в таких условиях. Рассмотрим интеграл

$$\sum_n \int dp_y \frac{e^{-\varkappa_n x}}{\varkappa_n}, \quad \varkappa_n = \sqrt{p_y^2 - (i\omega_n + \mu)^2}, \quad \omega_n = \frac{\pi}{\beta}(2n + 1) \quad (7.1)$$

Попробуем его просуммировать двумя способами

Способ I (взятие контурного интеграла). Известно, что $\frac{\beta}{2} \text{th}(\frac{\beta p_0}{2})$ имеет вычеты как раз в точках $i\omega_n$ равные 1. Тогда:

$$\sum_n \int dp_y \frac{e^{-\varkappa_n x}}{\varkappa_n} = \oint \frac{dp_0}{2\pi i} \frac{\beta}{2} \text{th}(\frac{\beta p_0}{2}) \int dp_y \frac{e^{-\varkappa x}}{\varkappa} =$$

Видно, что эти интегралы расходятся. Возможно, это связано с тем, что не только $\frac{1}{2T} \text{th}(\frac{p_0}{2T})$ имеет одинаковые вычеты в нужных точках и его необходимо доопределять в правой и левой частях комплексной плоскости по-разному. Тогда продеформируем начальный контур в контур вокруг разрезов (γ_+ в правой полуплоскости, γ_- - в левой) и прибавим единицу к гиперболическому тангенсу в левой плоскости, и вычтем - в правой. Математически прибавление или вычитание единицы не добавляет полюсов в подынтегральную функцию. Физически это соответствует вычитанию "фоновых" частиц, которых на самом деле не существует, но которые были необходимы как временная мера, чтобы уравнения приняли удобный вид и можно

было деформировать контур, так как подынтегральная функция была аналитической.

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_-} dp_0 (\operatorname{th}(\frac{\beta p_0}{2}) + 1) \frac{\beta}{2} \int dp_y \frac{e^{-zx}}{z} + \frac{1}{2\pi i} \oint_{\gamma_+} dp_0 (\operatorname{th}(\frac{\beta p_0}{2}) - 1) \frac{\beta}{2} \int dp_y \frac{e^{-zx}}{z} = \\
& \oint_{\gamma_-} \frac{dp_0}{e^{-\beta p_0} + 1} \int dp_y \frac{\beta e^{-zx}}{2\pi i z} - \oint_{\gamma_+} \frac{dp_0}{e^{\beta p_0} + 1} \int dp_y \frac{\beta e^{-zx}}{2\pi i z} = \\
& \int dp_y \int_{-\infty}^{-|p_y|-\mu} \frac{\beta dp_0}{e^{-\beta p_0} + 1} \frac{e^{-zx} + e^{zx}}{2\pi i z} - \int dp_y \int_{|p_y|-\mu}^{\infty} \frac{\beta dp_0}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{e^{-zx} + e^{zx}}{2\pi i z} = \\
& 2 \int dp_y \int_{-\infty}^{-|p_y|-\mu} \frac{\beta dp_0}{e^{-\beta p_0} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2})}{2\pi i \cdot i \sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2}} + 2 \int dp_y \int_{|p_y|-\mu}^{\infty} \frac{\beta dp_0}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2})}{2\pi i \cdot i \sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2}} = \\
& -\frac{\beta}{\pi} \int dp_y \int_{|p_y|-\mu}^{\infty} \frac{dp_0}{e^{\beta p_0} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2})}{\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2}} - \frac{\beta}{\pi} \int dp_y \int_{-\infty}^{-|p_y|-\mu} \frac{dp_0}{e^{-\beta p_0} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2})}{\sqrt{(p_0 + \mu)^2 - p_y^2}} = \\
& [p_0 + \mu = z] = -\frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} dp_y \int_{p_y}^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z-\mu)} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{z^2 - p_y^2})}{\sqrt{z^2 - p_y^2}} - \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} dp_y \int_{p_y}^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(\mu+z)} + 1} \frac{\cos(x\sqrt{z^2 - p_y^2})}{\sqrt{z^2 - p_y^2}} = \\
& -\frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z-\mu)} + 1} \int_0^z dp_y \frac{\cos(x\sqrt{z^2 - p_y^2})}{\sqrt{z^2 - p_y^2}} - \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(\mu+z)} + 1} \int_0^z dp_y \frac{\cos(x\sqrt{z^2 - p_y^2})}{\sqrt{z^2 - p_y^2}} = \\
& [p_y \rightarrow p \cdot z] = -\frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z-\mu)} + 1} \int_0^1 dp \frac{\cos(xz\sqrt{1-p^2})}{\sqrt{1-p^2}} - \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(\mu+z)} + 1} \int_0^1 dp \frac{\cos(xz\sqrt{1-p^2})}{\sqrt{1-p^2}} = \\
& [p \rightarrow z \sin(\alpha)] = -\frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z-\mu)} + 1} \int_0^{\pi/2} d\alpha \cos(xz \cos \alpha) - \frac{2\beta}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(\mu+z)} + 1} \int_0^{\pi/2} d\alpha \cos(xz \cos \alpha) = \\
& -\beta \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z-\mu)} + 1} J_0(xz) - \beta \int_0^{\infty} \frac{dz}{e^{\beta(z+\mu)} + 1} J_0(xz) \tag{7.2}
\end{aligned}$$

В формуле (7.2) первое слагаемое относится к электронной плотности, так как соответствующий интеграл брался по области положительных энергий, второе - к дырочной.

Способ II (фурье преобразование). Этот способ основан на решении вспомогательного уравнения двумя способами:

$$-(\partial_\tau + E)G = \delta(\tau - \tau') \tag{7.3}$$

Решим его посредством представления решения в ряд Фурье по мацубаровским частотам:

$$G = \frac{1}{\beta} \sum_n \frac{e^{-i\omega_n(\tau-\tau')}}{i\omega_n - E} \quad (7.4)$$

И посредством точного решения дифференциального уравнения:

$$\begin{aligned} (\partial_\tau + E)G_0 &= 0 \\ G_0 &= Ce^{-E\tau} \\ G &= e^{-E(\tau-\tau')} \begin{cases} C_1, & \tau > \tau' \\ C_2, & \tau \leq \tau' \end{cases} \\ -(\partial_\tau + E)G &= (C_2 - C_1)\delta(\tau - \tau') \\ C_2 = C_1 + 1 &\Rightarrow G = e^{-E(\tau-\tau')}(C_1 + \theta(\tau' - \tau)) \end{aligned} \quad (7.5)$$

Условие антисимметричности тфГ позволяет найти константу C_1 :

$$G(\tau = 0) = -G(\tau = \beta), \quad \tau' \in (0; \beta] \quad (7.6)$$

$$e^{-E\tau'}(C_1 + \theta(\tau')) = -e^{-E(\beta-\tau')}(C_1 + \theta(\tau' - \beta))$$

$$(C_1 + 1) = -e^{-\beta E}C_1$$

$$C_1 = -\frac{1}{e^{-\beta E} + 1}$$

$$G = e^{-E(\tau-\tau')} \left(\theta(\tau' - \tau) - \frac{1}{e^{-\beta E} + 1} \right) \quad (7.7)$$

$$G = e^{-E(\tau-\tau')} \left(\frac{1}{e^{\beta E} + 1} - \theta(\tau - \tau') \right) \quad (7.8)$$

Приравнивая решения, полученные разными способами, получаем

$$\sum_n \frac{e^{-i\omega_n t}}{i\omega_n - E} = \beta e^{-Et} \left(\frac{1}{e^{\beta E} + 1} - \theta(t) \right) \quad (7.9)$$

Удобна также формула, которая получается из предыдущей, если положить $t = 0$ и определить $\theta(0) = 0$ ($\theta(0) = 1$), чтобы получить плотность частиц (античастиц):

$$\sum_n \frac{1}{i\omega_n - E} = \frac{\beta}{e^{\beta E} + 1} \quad \left(\sum_n \frac{1}{i\omega_n - E} = -\frac{\beta}{e^{-\beta E} + 1} \right) \quad (7.10)$$

Вернемся к суммированию первоначального ряда. Удобно изначально перейти от координаты x к импульсу p_1 посредством Фурье-преобразования:

$$\sum_n \int dp_y \frac{e^{-z_n x}}{z_n} e^{i\omega_n t} = \frac{1}{2\pi} \sum_n \int dp_1 dp_y \frac{2e^{ip_1 x} e^{i\omega_n t}}{p_1^2 + p_y^2 - (i\omega_n + \mu)^2} = \quad (7.11)$$

И к полярным координатам:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \sum_n \int p dp d\varphi \frac{e^{ipx \cos \varphi} e^{i\omega_n t}}{p^2 - (i\omega_n + \mu)^2} &= 2 \sum_n \int p dp \frac{J_0(px) e^{i\omega_n t}}{p^2 - (i\omega_n + \mu)^2} = \\ &= \int J_0(px) dp \sum_n e^{i\omega_n t} \left(\frac{1}{i\omega_n + \mu + p} - \frac{1}{i\omega_n + \mu - p} \right) = \end{aligned} \quad (7.12)$$

Пользуясь вспомогательной формулой (7.10) окончательно получаем:

$$\begin{aligned} -\beta \int dp J_0(px) \left(\frac{1}{e^{\beta(p-\mu)} + 1} + \frac{1}{e^{\beta(p+\mu)} + 1} \right) &= \\ -\beta \int_0^\infty \frac{dp}{e^{\frac{p-\mu}{T}} + 1} J_0(xp) - \beta \int_0^\infty \frac{dp}{e^{\frac{\mu+p}{T}} + 1} J_0(xp) & \quad (7.13) \end{aligned}$$

Как видим, оба способа дают одинаковые ответы даже на функциях с корневыми особенностями. Несмотря на то, что второй способ кажется более простым и коротким, на более общих задач прекрасно работает первый.

Список литературы

1. P. R. Wallace. (1947) *The Band Theory of Graphite* . Phys. Rev. 71, 622
2. Oshima, C.; Nagashima, A. (1997). *Ultra-thin epitaxial films of graphite and hexagonal boron nitride on solid surfaces* . J. Phys.: Condens. Matter 9: 1–20
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov *Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films* // Science. — 2004. — Т. 306. — № 5696. — С. 666–669.
4. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. *Методы квантовой теории поля в статистической физике*. — М.: Добросвет, КДУ, 2006
5. M.I. Katsnelson *Graphene. Carbon in Two Dimensions*, (Cambridge University press, 2012)
6. A. R. Akhmerov, C. W. J. Beenakker *Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice*, Phys. Rev. B 77, 085423 – 2008
7. Agustin Nieto *Evaluating sums over the Matsubara frequencies*, Computer Physics Communication, 1994
8. C. G. Beneventano, E. M. Santangelo *Boundary conditions in the Dirac approach to graphene devices*, Int. J. Mod. Phys. Conf. Ser. 14, 240 (2012)