Письма в ЖЭТФ, том 36, вып. 10, стр. 365 – 367 *20 ноября 1982 г.*

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ ЭЛЕКТРОНА НА ДОНОРНО-АКЦЕПТОРНОЙ ПАРЕ.

Б.Л.Гельмонт

Рассмотрена задача о зависимости энергии электрона, связанного на донорно-акцепторной паре, от расстояния R между донором и акцептором. Показано, что критическое расстояние R_c является существенно особой точкой, в которой сходится бесконечное число уровней.

Электрон имеет связанные состояния на донорно-акцепторной паре, если расстояние R между донором и акцептором превышает критическую величину R_c. Вариационный расчет с помощью однопараметрической волновой функции дает $R_c = 1{,}75\, a_B$ [1], где a_B – боровский радиус электрона. Однако, как было показано в статье [2], в которой решалась задача об уровнях энергии электрона, связанного на протоне и отрицательно заряженном мезоне, вариационная функция дает довольно плохое приближение, так как точное значение $R_c = 0{,}639\, a_B$. Таким образом, вариационный метод дает заниженное больше, чем на порядок (в 20 раз), значение концентрации примесей, до которых существуют связанные на донорно-акцепторных парах состояния электрона. Представляет интерес проанализировать поведение энергии электрона E вблизи точки R_c. Ниже будет показано, что точка R_c представляет собой существенно особую точку для функции $E(R)$. Функция $E(R)$ многозначная, в точке $R = R_c$ сходится бесконечное число ветвей.

В эллиптических координатах решение уравнения Шредингера для электрона, связанного на донорно-акцепторной паре, сводится к решению двух обыкновенных дифференциальных уравнений [2,3]:

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{dM}{d\xi}\right]+\left[\lambda^2+\frac{1}{4}+\epsilon\xi^2-m^2(\xi^2-1)^{-1}\right]M=0,\quad \infty>\xi\geqslant 1, \tag{1}$$

$$\frac{d}{d\eta}\left[(1-\eta^2)\frac{dN}{d\eta}\right]-\left[\lambda^2+\frac{1}{4}+\epsilon\eta^2+m^2(1-\eta^2)^{-1}\right]N=0,\quad -1\leqslant\eta\leqslant 1. \tag{2}$$

Здесь $\epsilon = ER^2/4E_B a_B^2$, E_B – боровская энергия электрона, m – магнитное квантовое число, λ – параметр разделения, $\psi = M(\xi)N(\eta)\exp(im\varphi)$.

Рассмотрим задачу об энергии состояний с $m = 0$, к которым принадлежит и основное состояние. При $\epsilon = 0$ решение, конечное при $\xi = 1$, имеет вид

$$M(\xi) = F\left(\frac{1}{2} + i\lambda,\ \frac{1}{2} - i\lambda;\ \frac{1-\xi}{2}\right), \tag{3}$$

где $F(a, \beta; \gamma; z)$ – гипергеометрическая функция. Область связанных состояний лежит при вещественных значениях λ. Значению $\lambda = 0$ отвечает $R_c = 0{,}639 a_B{}^2$. При $\frac{R}{R_c} - 1 << 1$ величина $|\epsilon| << 1$. В этом случае можно найти поведение в двух перекрывающихся областях. При $1/\sqrt{|\epsilon|} >> \xi >> 1$ из (3) имеем

$$M(\xi) = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2}{\xi}}\left\{\frac{1}{\lambda}\sin\left(\lambda \ln\frac{\xi}{2}\right) + 4(\ln 2)\cos\left(\lambda \ln\frac{\xi}{2}\right)\right\}. \tag{4}$$

В области $\xi >> 1$ уравнение (1) имеет решение, конечное при $\xi \to \infty$

$$M(\xi) = \frac{C}{\sqrt{\xi}} K_{i\lambda}(\xi\sqrt{-\epsilon}), \tag{5}$$

где C – постоянная, $K_{i\lambda}(z)$ – модифицированная функция Бесселя третьего рода. Сшивка (4) и (5) в области $1/\sqrt{|\epsilon|} >> \xi >> 1$ приводит к уравнению, связывающему λ и ϵ. В наинизшем по λ приближении

$$\frac{\sin\left(\frac{\lambda}{2}\ln|\epsilon|\right) + \lambda\gamma\cos\left(\frac{\lambda}{2}\ln|\epsilon|\right)}{\cos\left(\frac{\lambda}{2}\ln|\epsilon|\right) - \lambda\gamma\sin\left(\frac{\lambda}{2}\ln|\epsilon|\right)} = 4\lambda\ln 2, \tag{6}$$

где γ – постоянная Эйлера. Из (6) получаем явную связь между ϵ и λ

$$\lambda_n = 2\pi n(8\ln 2 - 2\gamma - \ln|\epsilon|)^{-1}, \tag{7}$$

где $n = 1, 2 \ldots$ – произвольное целое положительное число.

С другой стороны, при $\lambda << 1$ из (2) следует, что

$$\lambda^2 = A(R - R_c), \tag{8}$$

где

$$A = -2\int_{-1}^{1} d\eta\, \eta N_0^2(\eta)\left[\int_{-1}^{1} d\eta_1 N_0^2(\eta_1)\right]^{-1} > 0, \tag{9}$$

$N_0(\eta)$ – решение уравнения (3) при $\epsilon = 0, \lambda = 0, m = 0$. Из (7) – (8) получим зависимость ϵ от $R - R_c$

$$\epsilon_n = -256\exp\left[-2\gamma - \frac{2\pi n}{\sqrt{A(R - R_c)}}\right]. \tag{10}$$

Таким образом, точка R_c является существенно особой точкой для функции $\epsilon(R)$. Бесконечное число уровней сходится в этой точке,

Процедура для определения величины R_c состоит в следующем. Из уравнения (1) находится значение λ, при котором показатели дифференциального уравнения (1) сливаются в окрестности точки $\xi = \infty$, а затем решается (2) с найденным значением λ. Поведение решений при $\xi \to \infty$ не зависит от m. Поэтому величина R_c одна и та же для всех уровней.

Таким образом, картину изменения уровней системы при переходе от $R \to \infty$ к $R \doteq R_c$ можно представить себе следующим образом. При $R \to \infty$ электрон находится вблизи донора и имеет водородоподобный спектр уровней. По мере сближения донора и акцептора уменьшается (по абсолютной величине) энергия основного состояния и одновременно сокращается расстояние между уровнями, причем энергия всех уровней стремится к нулю при $R \to R_c$, т.е. все уровни собираются в пучок в точке R_c, и для каждой ветви $\epsilon_n(R)$ точка R_c является существенно особой.

Литература

1. *Hopfield J.J.* Physics of Semiconductors, Proc. of the 7-th Intern. Conf., Paris, 1964, 725.
2. *Wightman A.S.* Phys. Rev., 1950, 77, 521.
3. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Физматгиз, 1963, стр. 331.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
4 ноября 1982 г.