Краткие сообщения по физике № 3-1986 г.

УДК 530.145+535.34

ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ДВУХ ПРИТЯГИВАЮЩИХ КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩИХ ПОТЕНЦИАЛОВ И ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА

В.С. Виноградов

Рассчитаны точно полная ортонормированная система волновых функций парного комплекса с короткодействующими потенциалами и коэффициент поглощения света таким комплексом. Изучено поведение резонансного состояния.

Модель двух короткодействующих потенциалов исследовалась и применялась в /1,2/. В /1/ были найдены волновые функции (ВФ) связанных состояний и решена задача ионизации отрицательного иона атомом. В обзоре /2/ обсуждаются аналитические свойства термов связанных состояний, а также приводятся отдельные ВФ непрерывного спектра и сечения рассеяния. Для расчета вероятностей переходов, коэффициента поглощения света и других величин необходимо иметь полную ортонормированную систему ВФ. В данной работе найдена такая система ВФ и рассчитан коэффициент поглощения света парным центром. Последняя задача особенно актуальна в связи с возросшим интересом к "эффектом конечных состояний" в физике примесных центров /3,4/.

Уравнение Шредингера системы имеет вид:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\Delta + V_1(\vec r) + V_2(\vec r)\right]\Psi = E\Psi, \tag{1}$$

где псевдопотенциал $V_i(\vec r) = -A_i\delta(\vec r - \vec r_i)f(\vec r - \vec r_i)$, $A_i = -4\pi E_{oi}a_i^3$, $E_{oi} = \hbar^2 a_i^2/2m^*$ – энергия ионизации изолированного центра с номером i, оператор $f(\vec r) = 1 + \vec r\nabla_{\vec r}$ снимает сингулярность r^{-1} в ВФ.

Уравнение (1) не допускает полного разделения переменных в цилиндрических координатах φ, ρ, z. Поэтому задача нахождения ВФ решалась методом последовательной ортогонализации /5,6/, позволяющим получить ВФ в таком представлении, в котором они разделяются на обращающиеся в нуль и на отличные от нуля в точках $\vec r_1$, $\vec r_2$.

ВФ связанных состояний имеют вид /1/:

$$\Psi^i(\vec r) = B^i(1)\frac{\exp(-\alpha_i|\vec r - \vec r_1|)}{|\vec r - \vec r_1|} + B^i(2)\frac{\exp(-\alpha_i|\vec r - \vec r_2|)}{|\vec r - \vec r_2|} \qquad (i = 1,2), \tag{2}$$

где $B^i(1) = C_+^i\,\mathrm{sign}(a_1 - \alpha_i)(|a_2 - \alpha_i|)^{1/2}$; $B^i(2) = -C_+^i(|a_1 - \alpha_i|)^{1/2}$; $C_+^i = (\alpha_i r_{12}/2\pi)^{1/2}(|(a_1 - \alpha_i)r_{12} + (a_2 + \alpha_i)r_{12} - 2r_{12}^2(a_1 - \alpha_i)(a_2 - \alpha_i)|)^{-1/2}$; $E_i = \hbar^2\alpha_i^2/2m^*$; r_{12} – расстояние между центрами; α_1, α_2 находятся из уравнения $\exp(-2\alpha_i r_{12}) = r_{12}^2(a_1 - \alpha_i)(a_2 - \alpha_i)$. Состояния пронумерованы так, что $\alpha_1 \leqslant a_1 \leqslant a_2 \leqslant \alpha_2$ (здесь $a_i > 0$). Выражения (2) справедливы также в случаях, когда одна или обе величины $a_i < 0$, т.е. при наличии виртуальных состояний.

При $a_1 a_2 r_{12}^2 \geqslant 1$ имеются два связанных состояния, при $a_1 a_2 r_{12}^2 < 1$ одно из них переходит в непрерывный спектр. ВФ состояний непрерывного спектра с проекцией момента $m \neq 0$ на ось центров (z) имеют вид:

$$\Psi_{E,m,k_z}(\vec r) = (m^*/4\pi^2\hbar^2)^{1/2}\exp(im\varphi + ik_z z)\,\mathrm{Im}(\rho\sqrt{k^2 - k_z^2}), \tag{3}$$

где $E = \hbar^2 k^2/2m^*$. ВФ с $m = 0$ приведем для случая $a_1 = a_2 = a_0$, когда выражения для них относительно просты. ВФ с $n = 1$ (число $n - 1$ – аналог полного момента l в сферически симметричных системах), $m = 0$, $i = 1,2$ имеют вид /2/:

$$\Psi^{(1,2)}_{E,1,0}(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left(\frac{m^*}{a_0 \gamma_\pm} \right)^{1/2} \left[\frac{\sin(k|r - r_1| - \delta_\pm)}{|\vec{r} - \vec{r}_1|} \pm \frac{\sin(k|\vec{r} - \vec{r}_2| - \delta_\pm)}{|\vec{r} - \vec{r}_2|} \right], \qquad (4)$$

где $\mathrm{tg}\,\delta_\pm = \gamma_\pm/\Delta_\pm$, $\gamma_\pm = (k/a_0)(1 \pm \sin kr_{12}/kr_{12})$, $\Delta_\pm = 1 \pm \cos kr_{12}/a_0 r_{12}$.
Отметим возможность $\Delta_- = 0$, $\gamma_- \approx 0$, когда в непрерывном спектре возникает резонанс.

ВФ с $n \neq 1$, $m = 0$, $i = 1,2$ описываются выражениями:

$$\Psi^{i}_{E,n,0}(\vec{r}) = (m^*/2\pi^2\hbar^2)^{1/2} \int_0^k dx\,(\chi^i_n \tau)\, J_0(\rho\sqrt{k^2 - x^2}), \qquad (5)$$

где $(\chi_n \tau)$ – скалярное произведение двухкомпонентных векторов $\tau = (\cos xz, \sin xz)$ и χ^i_n; $\chi^i_n = D(N,\varphi)/(D(N)D(N-1))^{-1/2}$, $N = 2(n-1) + i$, $i = 1,2$. Здесь $D(N)$ – детерминант ранга N, составленный из элементов

$$J^{ij}_{mn} = \int_0^k \varphi^i_m(k,x)\varphi^j_n(k,x)\,dx,$$

а $D(N,\varphi)$ – детерминант $D(N)$, у которого последняя строчка заменена на строчку $\varphi^1_1, \varphi^2_1, \varphi^1_2, \varphi^2_2, \ldots$. Функции φ^i_n задаются соотношениями :

$$\varphi^i_{2m+1}(k,x) = (N^i_{2m+1})^{-1/2}\, \varphi_1(k,x)\,(k^2 - x^2)^m;$$

$$\varphi^i_{2m}(kx) = (N^i_{2m})^{-1/2}\,[d\varphi^i_1(k,x)/d(xr_{12}/2)]\,x\,(k^2 - x^2)^{m-1}, \quad (m \neq 0);$$

$$\varphi^1_1 = \chi^1_1 = -[k(1+\sigma)/2]^{-1/2}(\cos(xr_{12}/2),\ 0);$$

$$\varphi^2_1 = \chi^2_1 = -[k(1-\sigma)/2]^{-1/2}\,(0,\ \sin(xr_{12}/2));$$

$$N^i_n = J^{ii}_{nn}; \quad \sigma = \sin(kr_{12})/kr_{12}.$$

В пределе $r \to \infty$ восстанавливается сферическая симметрия системы, и функции $\Psi^i_{E,n,0}$ становятся пропорциональными полиномам Лежандра с индексом $l = n - 1$.

С помощью ВФ (2) – (5) были рассчитаны мнимые части диэлектрической функции в случае переходов из основного состояния E_2 в возбужденное E_1 и в состояния непрерывного спектра при двух направлениях поляризации света относительно оси центров :

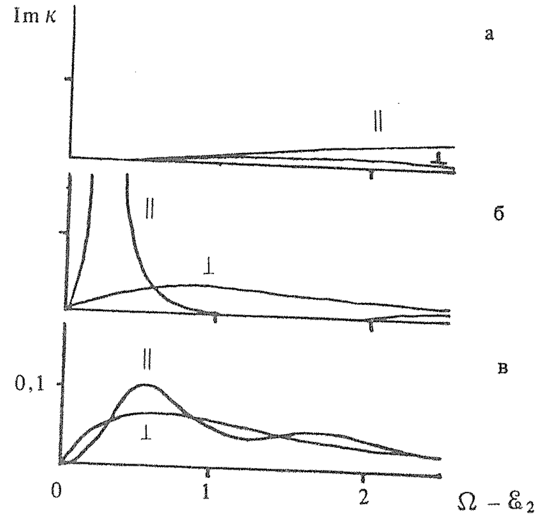
$$\mathrm{Im}\,\kappa_{\perp,\parallel} = \kappa_0 \frac{x_2}{x_0[1 + \exp(-x_2)]} \frac{(\Omega - \mathcal{E}_2)^{3/2}}{\Omega^4} G_{\perp,\parallel}/y). \qquad (6)$$

В случае параллельной поляризации (‖) к (6) следует добавить выражение:

$$\mathrm{Im}\,\Delta\kappa_{\parallel} = \kappa_0 \frac{3\pi x_2}{x_0^5\Omega^4[1+\exp(-x_2)]}\left[\Theta(x_0-1)\frac{2x_1\bar{L}^2}{x_0[1-\exp(-x_1)]}\times\right.$$

$$\left.\times\,\delta(\Omega+\mathcal{E}_1-\mathcal{E}_2)+\pi M^2(y)\frac{\gamma_-(y)}{\gamma_-^2(y)+\Delta_-^2(y)}\right].$$

Здесь $\kappa_0 = 16\pi n_0 e^2\hbar^2/(3m^*E_0^2)$; n_0 – концентрация пар; $E_0 = \hbar^2 a_0^2/2m^*$; $x_0 = a_0 r_{12}$; $x_i = a_i r_{12}$; $\Omega = \hbar\omega/E_0$; $\mathcal{E}_i = E_i/E_0$; $y = kr_{12} = (\Omega-\mathcal{E}_2)^{1/2}x_0$; $\Theta(x)$ – ступенчатая функция ($\Theta = 1$ при $x > 0$ и $\Theta = 0$ при $x \leqslant 0$); $G_\perp(y) = 1 + 3(\pi/2)^{1/2}y^{-3/2}J_{3/2}(y)$; $G_\parallel(y) = 1 + 3(\pi/2)^{1/2}y^{-1/2}[J_{1/2}(y) - 2y^{-1}J_{3/2}(y) - (3\pi/2y)J_{3/2}^2(y)(1-\sin y/y)^{-1}$; $\bar{L} = (1+x_2)\exp(-x_2) - (1+x_1)\exp(-x_1)$; $M(y) = (1+x_2)\times\exp(-x_2) + (\pi/2)^{1/2}y^{3/2}[J_{-3/2}(y) + J_{3/2}(y)\Delta_-(y)/\gamma_-(y)]$.



Р и с. 1. Коэффициент поглощения света парным комплексом в зависимости от частоты при различных направлениях поляризации и расстояниях между центрами $x_0 = 0,5$ (а), 0,9 (б), 10 (в).

На рис. 1 изображены функции $\mathrm{Im}\kappa_{\perp,\parallel}/\kappa_0$ в зависимости от $\Omega - \mathcal{E}_2$ при нескольких значениях безразмерного расстояния x_0. С уменьшением x_0 резонанс появляется, а потом размывается. Энергии ионизации связанных состояний при этих значениях x_0 равны: $x_0 = 10$; $\mathcal{E}_1 \cong \mathcal{E}_2 = 1{,}00000$; $x_0 = 0{,}9$; $\mathcal{E}_2 = 1{,}78049$; $x_0 = 0{,}5$; $\mathcal{E}_2 = 3,27373$.

Автор благодарен А.Н. Георгобиани и А.Н. Грузинцеву, привлекшим его внимание к рассмотренной задаче.

ЛИТЕРАТУРА

1. Смирнов В.М., Фирсов О.В. ЖЭТФ, 47, 232 (1964).
2. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л., изд. Ленинградского университета, 1975.
3. Jones I.L., Inkson J.C. Sol. St. Comm., **51**, 59 (1984).
4. Иманов Э.З., Колчанова Н.М., Яссиевич И.Н. ФТТ, 27, 1492 (1985).
5. Виноградов В.С. ФТТ, **13**, 3266 (1971).
6. Jeganova I.A., Shirokov M.I. Ann. der Phys., **21**, 225 (1968).

Поступила в редакцию 12 ноября 1985 г.