

В. Л. БОНЧ-БРУЕВИЧ

ЛОКАЛИЗОВАННЫЕ СОСТОЯНИЯ СО СТЕПЕННОЙ АСИМПТОТИКОЙ

(Представлено академиком И. М. Лифшицем 11 VII 1975)

1. В работе ⁽¹⁾ были получены некоторые результаты, свидетельствующие, видимо, о возможной степенной асимптотике волновых функций, отвечающих локализованным состояниям электронов в неупорядоченных полупроводниках. Сама по себе возможность степенной локализации решений уравнения Шредингера давно известна ^(2, 3) *. Решение, указанное в работах ^(2, 3), однако, принадлежит непрерывному спектру и отвечает лишь одному конкретному виду потенциала. Тип спектра, которому принадлежат состояния, обнаруженные численным методом в работе ⁽¹⁾, не ясен, а сравнительно небольшой — по необходимости — размер исследованной там системы затрудняет решение вопроса о вероятности их реализации. По этой причине желательным кажется аналитическое исследование задачи. В настоящей статье указываются некоторые классы потенциалов, порождающих локализованные состояния со степенной асимптотикой.

2. Одномерная задача. Прием, позволяющий исследовать интересующие нас решения, указан в ^(2, 3): надо написать волновую функцию заданного вида и, пользуясь уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V\psi = E\psi, \quad (1)$$

определить, какой потенциал ее порождает.

Положим $\hbar=2m=1$ и будем считать координаты безразмерными, измеряя их в единицах некоторой характерной длины a . Начало отсчета энергии совместим с исследуемым уровнем, полагая $E=0$.

Интересующее нас решение имеет вид

$$\psi = P_1(x^2) P_2^{-1}(x^2), \quad (2)$$

где P_1 и P_2 — вещественные полиномы степени соответственно n_1 и n_2 , причем $n_2 - n_1 > 1/4$. Полином P_2 не должен иметь вещественных положительных корней; P_1 может их иметь, но, ограничиваясь только не сингулярными потенциалами, мы должны наложить в этих точках условия $P_1'' - 2P_1'P_2'P_2^{-1} = 0$. В остальном коэффициенты и степени полиномов произвольны. Потенциал, порождающий решение (2), убывает на бесконечности как x^{-2} . Частный случай выражения (2) указан в ⁽⁵⁾.

3. Трехмерная задача. Сферически симметричное решение со степенной локализацией можно записать в виде (2), заменяя там x^2 на радиальную координату r и накладывая условие $n_2 - n_1 > 3/2$. При этом потенциал $V(r)$ не будет иметь и сингулярностей кулоновского типа, если в P_1 и P_2 отсутствуют слагаемые, линейные по r .

Асимптотически при $r \rightarrow \infty$ потенциал вновь убывает как r^{-2} . Поле как раз такого типа может возникнуть в твердом теле в результате взаимодействия квазичастицы с полем упругих напряжений, создаваемых точечным дефектом структуры.

* Автор признателен Л. А. Пастуру, обратившему его внимание на это обстоятельство.

Могут существовать также и волновые функции со степенной асимптотикой, не обладающие сферической симметрией. Простейшее решение такого вида получается из (2) заменой x^2 на r и умножением правой части на сферическую функцию $Y_l^m(\theta, \varphi)$, где θ и φ — полярные углы. При этом в потенциальной энергии V появляется добавок $l(l+1)r^{-2}$; соответственно в разложении $P_1 P_2^{-1}$ должны отсутствовать слагаемые степени, меньшей l .

Более интересны, однако, другие случаи. Пусть

$$\psi = \sum_{l,m} a_{l,m} Y_l^m(\theta, \varphi) R_{ml}(r), \quad (3)$$

где $a_{l,m}$ — произвольные коэффициенты, R_{ml} — отношение двух полиномов с указанными ранее свойствами (степени и коэффициенты их могут зависеть от l, m). Соответствующий потенциал, согласно (1), зависит от полярных углов. Асимптотически при $r \rightarrow \infty$ он ведет себя как $c(\theta, \varphi)r^{-2}$, где $c(\theta, \varphi)$ — некоторая функция полярных углов. В частности, это может быть и потенциал диполя ($c = d \cos \theta$, где d — постоянная). Так обстоит дело, если при $r \gg 1$ $R_{lm} \sim r^{-n}$, где число n не зависит от l, m , а коэффициенты разложения (3) удовлетворяют (видимо, хорошо известному) соотношению

$$l(l+1)a_{l,m} + d[I_{l,l+1}a_{l+1,m} + I_{l,l-1}a_{l-1,m}] = n(n-1)a_{l,m}; \quad (4)$$

$$I_{l,l\pm 1} = \int_{-1}^{+1} P_l^m(t) t P_{l\pm 1}^m(t) dt.$$

Очевидно, степенная локализация в поле диполя имеет место, если собственное значение уравнения (4) $n(n-1) > 3/4$.

От полярных углов могут зависеть и коэффициенты полиномов P_1 и P_2 . При этом, чтобы избежать сингулярностей в соответствующем потенциале, в разложениях коэффициентов полиномов по сферическим функциям не должно быть слагаемых с $|m| < 2$.

Показатели степени n_1, n_2 также могли бы зависеть от полярных углов (с указанным только что ограничением). При этом в выражении для потенциала появились бы слагаемые типа

$$r^{-2} \ln(1 + a_{n_2} r^2) \frac{\partial^2 n_2}{\partial \theta^2},$$

где a_{n_2} — коэффициент при старшем члене.

4. Случайное поле и дискретные уровни. Как видно из предыдущего (см., в частности, первую из формул (4)), уровень $E=0$ совпадает с нижней границей непрерывного спектра. Очевидно, он почти вырожден — сколь угодно близкой к нему энергии $E>0$ отвечает обычная нелокализованная волновая функция непрерывного спектра. Это вырождение, однако, снимается едва ли не любым возмущением. В неупорядоченных полупроводниках роль последнего может играть случайное поле, часто возникающее в таких материалах; потенциальная энергия электрона в этом поле δV добавляется к изучавшейся в предыдущих параграфах величине V . Последнюю при этом надо относить к одной, выделенной, «потенциальной яме», состояния электронов в которой мы изучаем. Будем считать концентрацию этих потенциальных ям достаточно малой, так что взаимодействием между ними можно пренебречь. Тогда случайное поле, описываемое потенциальной энергией δV , должно иметь другую природу (так, например, оно может быть обусловлено хаотически распределенными ионами примеси). В указанных условиях после снятия вырождения уровень, отвечающий локализованной волновой функции, либо сдвинется дальше в область непрерывного спектра, либо станет дискретным. Ситуация особенно ясна, если случайная добавка δV сравнительно невелика, так что ее можно рассматривать по теории возмущений.

Заметим, что при $r \rightarrow \infty$ случайное поле с подавляющей вероятностью осциллирует*. Легко убедиться, что локализованный характер функций типа (3) и т. д. при этом с хорошей точностью сохраняется. Величина расщепления при данной конфигурации случайного поля составляет

$$\Delta E \simeq \int |\psi|^2 \delta V dr, \quad (5)$$

где ψ — локализованная функция. Соответствующий ей уровень становится дискретным при $\Delta E < 0$. Экспериментальный интерес представляют средние значения от некоторых функций ΔE , различных в зависимости от того, что именно измеряется. Так, при измерении концентрации носителей заряда и связанных с ней величин играет роль выражение $\langle \exp(\Delta E) \theta(-\Delta E) \rangle$, где θ — обычная ступенчатая функция, а угловые скобки обозначают указанное выше осреднение; в задаче о поглощении и излучении света частоты ω фигурирует величина $\langle \delta[-\Delta E - \hbar\omega] \rangle$ и т. д. Средние такого типа легко выражаются через характеристическую функцию рассматриваемого случайного поля⁽⁴⁾.

Автор весьма признателен акад. И. М. Лифшицу за обсуждение работы.

Московский государственный университет
им. М. В. Ломоносова

Поступило
2 VII 1975

ЛИТЕРАТУРА

¹ B. I. Last, D. I. Thouless, J. Phys., C, Sol. State Phys., v. 7, 699 (1974). ² I. von Neumann, E. P. Wigner, Phys. Zs., B. 30, 465 (1929). ³ А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. Изд. 2, Приложение А. М., «Наука», 1971. ⁴ В. Л. Бонч-Бруевич, ЖЭТФ, т. 61, 1168 (1971). ⁵ Ньютон, Теория рассеяния волн и частиц, М., «Мир», 1969.

* Коль скоро речь идет о макроскопически однородной неупорядоченной системе, выражение $r \rightarrow \infty$ нуждается в разъяснении. Такое можно найти, например, в работе⁽⁴⁾. Мы имеем в виду здесь первый («нетермодинамический») предельный переход. Отметим, что соответствующее характерное расстояние должно превышать радиус корреляции случайного поля.