

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

УДК 519.6+538.9

ЧИСЛЕННЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА С ОСОБЫМИ ТОЧКАМИ

А.Ф. Полупанов

Представлен явный численный метод решения задачи на собственные значения и связанных с ней проблем для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с особыми точками, а именно, радиального уравнения Шредингера, описывающего кулоновские состояния водородоподобного атома, в частности, состояния мелких донорных примесей в объёмном прямозонном полупроводнике или в полупроводниковой квантовой точке. Вычислены энергии и волновые функции нескольких нижайших дискретных состояний водородоподобного атома как в случае, когда известно точное аналитическое решение задачи, что позволяет оценить точность метода, так и в случаях, когда применимы только численные методы. Рассмотрены следующие проблемы: связанные состояния водородоподобной примеси в квантовой точке, волновая функция основного состояния водородоподобных атомов в модели потенциала центральной ячейки нулевого радиуса, связанные состояния для кулоновского потенциала с жёсткой сердцевиной.

An explicit numerical method is demonstrated for accurate solving the eigenvalue and related problems for the ordinary differential equation of the second order with singular points, namely the radial Schrödinger equation describing Coulomb states of a hydrogen-like atom in various cases, e.g. states of a shallow donor impurity in a bulk direct-gap semiconductor or in a semiconductor quantum dot. Energies and wave functions of some lowest discrete states are calculated both in the conventional case when exact analytical solution to the problem is known that makes possible to estimate accuracy of the method, and in cases when only numerical methods are applicable. The following problems are considered: bound states of a hydrogen-like impurity in a semiconductor quantum dot, ground state wave functions of the hydrogen-like atoms within the model of zero-radius central cell potential, bound states in the hardcore potential with Coulomb tail.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Численные методы, обыкновенные дифференциальные уравнения, особые точки, задача на собственные значения, кулоновский потенциал, потенциал с жёсткой сердцевиной.

1. ВВЕДЕНИЕ

Мы рассматриваем следующее радиальное уравнение Шредингера для кулоновских состояний

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\alpha}{r} + E \right\} R_l(r) = 0 \quad (1)$$

где $r > 0$ – радиальная переменная, l – неотрицательное целое (квантовое число орбитального углового момента), α – целое ($\alpha = 1$ соответствует кулоновскому притяжению в атоме водорода), $R_l(r)$ – кулоновская радиальная волновая функция, E – энергия. В общем случае, расстояния и энергия измеряются в единицах $a = \hbar^2 \kappa / (me^2)$ (эффективный боровский радиус) и $Ry = me^4 / (2\hbar^2 \kappa^2)$ (эффективный ридберг), соответственно, где e – заряд электрона, m – эффективная масса электрона, или приведённая масса – в случае относительного движения двух притягивающихся частиц (экситон), κ – статическая диэлектрическая проницаемость.

Уравнение (1) имеет две особые точки: регулярную особенность при $r = 0$ и иррегулярную особенность при $r = \infty$.

Уравнение (1) описывает кулоновские состояния атома водорода и водородоподобного атома в различных системах, например, состояния мелких донорных примесей в объёмных прямозонных полупроводниках или в полупроводниковых квантовых точках. В настоящей работе рассматривается задача на собственные значения и связанные с ней проблемы для уравнения (1). Энергии и волновые функции нескольких нижайших дискретных состояний вычисляются как в случае, когда известны точные аналитические решения задачи (см., например, [1,2]), что позволяет оценить точность расчётов, так и в задачах, решение которых возможны только с применением численных методов. Рассматривается задача о связанных состояниях водородоподобного атома в квантовой точке, о волновой функции основного состояния водородоподобных атомов в модели центрально-ячеечного потенциала нулевого радиуса [3,4], о связанных состояниях водородоподобного атома в модели кулоновского потенциала с жёсткой сердцевиной. Для решения этих проблем используются явные численно-аналитические методы, основанные на методе рекуррентных последовательностей [5, 6, 7].

Подстановка $\varphi(r) = \begin{pmatrix} rR \\ R + rR' \end{pmatrix}$ сводит (1) к системе двух уравнений первого порядка:

$$r \frac{d\varphi(r)}{dr} = A(r)\varphi(r), \quad (2)$$

где $A(r) = \alpha_0 + \alpha_1 r + \alpha_2 r^2$,

$$\alpha_0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ l(l+1) & 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2\alpha & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -E & 0 \end{pmatrix}.$$

Ясно (по определению, см. [8]), что точка $r = 0$ есть регулярная особая точка для уравнения (1), а $r = \infty$ – иррегулярная особенность (замена переменной $z = 1/r$). Методы построения решений уравнения (3), решения сингулярной задачи на собственные значения и задачи рассеяния для (3) развиты в [6,7] в общем случае, т.е. когда $A(r)$ – это произвольная голоморфная в окрестности $r = 0$ $n \times n$ матричная функция, а $\varphi(r)$ – n -мерный столбец. В данной работе рассматриваются решения уравнения, представленного в виде ОДУ второго порядка (1) (см. [5]).

2. ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ СИСТЕМА РЕШЕНИЙ

2.1. Окрестность регулярной особенности $r = 0$

Регулярное решение (1) имеет вид степенного ряда

$$R_l^R(r) = \sum_{n=l}^{\infty} a_n r^n, \quad (3)$$

Где коэффициенты a_n удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению

$$a_l = C, a_n = -\frac{2a_{n-1} + Ea_{n-2}}{(n-l)(n+l+1)}, n > l. \quad (4)$$

Ясно, что коэффициент a_l есть произвольная константа C , которая определяется нормировкой. Выражение для производной решения получается непосредственным дифференцированием (3).

Второе, иррегулярное решение (1) имеет вид алгебраической комбинации степенных рядов и логарифмической функции:

$$R_l^I(r) = \sum_{n=-l-1}^{\infty} b_n r^n + \ln r R_l^R(r). \quad (5)$$

Здесь $R_l^R(r)$ - это решение (3), (4) с коэффициентом a_l , определяемым равенством

$$a_l = -\frac{2b_{l-1} + Eb_{l-2}}{2l+1}.$$

Коэффициенты b_n удовлетворяют следующему рекуррентному соотношению

$$b_{-l-1} = D, b_l = 0, b_n = -\frac{2b_{n-1} + Eb_{n-2} + (2n+1)a_n}{(n-l)(n+l+1)}, \quad (6)$$

Выбор значения коэффициента b_l произволен и, для определённости, мы положили $b_l = 0$, что приводит к пропорциональности a_l и D . Значение константы D определяется нормировкой.

Следует отметить, что, как следует из [6, Теорема 4] формальные степенные ряды в (3), (5) сходятся при $r < \infty$ и определяют фундаментальную матрицу решений уравнения (1). Ясно, что при численном расчёте суммирование в (3) и (5) обрывают при некотором конечном $n = n_0$, выбираемом из соображений точности.

2.2. Окрестность иррегулярной особенности $r = \infty$

При построении асимптотических разложений решений в окрестности иррегулярной особенности $r = \infty$, будем следовать методу [5,9] (а не [7]). Подстановка $F_l(r) = r \cdot R_l(r)$ в (1) приводит его к виду

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2Z}{r} + E \right\} F_l(r) = 0. \quad (7)$$

В свою очередь, подстановка

$$F_l(r) = z_1(r) + z_2(r), \quad \frac{dF_l}{dr} = \lambda(z_1 - z_2), \quad \lambda = \sqrt{-E} \quad (8)$$

сводит (7) к следующему уравнению для функции $z(r) = \begin{pmatrix} z_1(r) \\ z_2(r) \end{pmatrix}$:

$$\frac{dz(r)}{dr} = A(r)z(r), \quad \text{где } A(r) = \sum_{n=0}^2 \frac{A_n}{r^n}. \quad (9)$$

$A(r)$ - 2×2 матричная функция с диагональным матричным коэффициентом A_0 :

$$A_0 = \lambda \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A_1 = \frac{\alpha}{\lambda} \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_2 = \frac{l(l+1)}{2\lambda} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Для нахождения асимптотического разложения решений (8) при $r \rightarrow \infty$ сделаем подстановку

$$z(r) = P(r)\omega(r), \quad (11)$$

где матричная функция $P(r)$ есть асимптотический ряд по обратным степеням r

$$P(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{P_n}{r^n},$$

причём полагаем, что P_0 - единичная матрица, т.е. $(P_0)_{ik} = \delta_{ik}$. Подчиним матрицу $P(r)$ такому требованию, чтобы функция $\omega(r)$ была решением уравнения

$$\frac{d\omega(r)}{dr} = B(r)\omega(r), \quad (12)$$

где $B(r)$ - диагональная матричная функция: $(B)_{ik} = (B)_i \delta_{ik}$, которая также есть асимптотический ряд по r^{-1} , т.е. $B(r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{r^n}$, причём, $B_0 = A_0$. Матрицы P_n и B_n удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям

$$A_0 P_n - P_n B_0 = P_0 B_n - \sum_{s=0}^{n-1} A_{n-s} P_s + \sum_{s=1}^{p-1} P_s B_{n-s} - (n-1)P_{n-1}, \quad n \geq 1. \quad (13)$$

Поскольку при нашем выборе матрицы B_0 выполняется равенство

$$A_0 P_n - P_n B_0 = [(A_0)_{ii} - (A_0)_{kk}](P_n)_{ik},$$

имеем:

$$(B_n)_i = -(H_n)_{ii}, \quad (14)$$

где

$$(H_n)_{ik} = -\sum_{s=0}^{n-1} A_{n-s} P_s + \sum_{s=1}^{p-1} P_s B_{n-s} - (n-1)P_{n-1}. \quad (15)$$

и произвол в выборе диагональных элементов матриц $(P_n)_{ii}$ при $n \geq 1$. Для определённости мы их полагаем равными нулю:

$$(P_n)_{ii} = 0, \quad n \geq 1. \quad (16)$$

При $i \neq k$ получаем из (13):

$$(P_n)_{ik} = \frac{(H_n)_{ik}}{((A_0)_{ii} - (A_0)_{kk})}, \quad n \geq 1 \quad (17)$$

Интегрирование уравнения (12) с диагональной матрицей B даёт:

$$\omega_i = C_i \exp((B_0)_i r + (B_1)_i \ln r - \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(B_n)_i}{(n-1)r^{n-1}}), \quad (18)$$

где C_i – произвольные константы, что приводит к следующему выражению для асимптотического разложения решений уравнения (9):

$$z_i = \omega_i + \sum_{n=1} \frac{(P_n)_{ik}}{r^n} \omega_k. \quad (19)$$

Следует отметить, что равенства (18), (19) дают выражение для асимптотического разложения решений (9) при $r \rightarrow \infty$ и в случае произвольного числа уравнений в системе (9). В рассматриваемом случае $n=2$, $E < 0$ (состояния дискретного спектра) нас будут интересовать только сходящиеся при $r \rightarrow \infty$ решения (7), (1). Соответствующие асимптотические разложения решения $F_l(r) = r \cdot R_l(r)$ и его

производной $\frac{dF_l}{dr} = R_l + r \frac{dR_l}{dr}$ имеют вид

$$F_i = \left(1 + \sum_{n=1} \frac{(P_n)_{12}}{r^n}\right) \omega_2, \quad \frac{dF_l}{dr} = \lambda \left(1 - \sum_{n=1} \frac{(P_n)_{12}}{r^n}\right) \omega_2, \quad (20)$$

где ω_2 определяется (18) с произвольной константой C_2 и $(B_0)_2 = -\lambda$.

3. СШИВКА РЕШЕНИЙ. ЗАДАЧА НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ

3.1. Стандартный случай

Стандартная задача на собственные значения для уравнения (1) на $[0, \infty)$ состоит в следующем: нужно найти такие значения параметра E : $E < 0$ (энергии), при которых решения $R_l(r)$ ограничены при $r = 0$ и $R_l(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$, нужно также найти решения, соответствующие этим собственным значениям E , и нормированные условием:

$$\int_0^\infty R_l^2(r) r^2 dr = 1 \quad (21)$$

Для решения задачи необходимо в некоторой промежуточной точке $r = \hat{r}$ сшить регулярное при $r = 0$ решение $R_l^R(r)$ (3) и его производную (lhs - «левое» решение), соответственно, с решением, сходящимся при $r \rightarrow \infty$, и его производной (см. (20)) (rhs - «правое» решение). Если обозначить через $\Phi_0(E)$ столбец, составленный из значений, принимаемых lhs (3) и его производной при $a_l = 1$ (4) в точке $r = \hat{r}$ при данном E , а – через $\Omega_0(E)$ - столбец из rhs и его производной при $C_2 = 1$, и определить 2×2 матрицу

$$A(E) = (\Phi_0(E), -\Omega_0(E)),$$

то для выполнения сшивки должно выполняться равенство:

$$A(E) \chi(E) = 0, \quad \chi(E) = \begin{pmatrix} a_1(E) \\ C_2(E) \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Таким образом, процедура вычисления некоторого собственного значения $E = E_0$ сводится к численному решению уравнения

$$\det A(E) = 0 \quad (23)$$

После определения собственного значения E_0 , решая (22) находим связь между компонентами вектора $\chi(E_0)$, а затем, используя (21), - значения констант $C_2(E_0)$ и $a_l(E_0)$, чем полностью определяем собственную функцию и её производную на $[0, \infty)$.

Следует отметить, что сшивка решений всегда может быть проведена с заданной точностью с помощью правильного выбора точки сшивки \hat{r} . Формально это можно выразить следующим образом: пусть $X = X(\hat{r})$ обозначает некоторый математический объект, который нужно вычислить (например, энергия, собственная функция), тогда

$$X_{\text{точное}} = \lim_{\hat{r} \rightarrow \infty} X(\hat{r}), \hat{r} \rightarrow \infty.$$

При практических вычислениях, для оценки ошибок удобно использовать вариацию точки сшивки $\hat{r} \rightarrow \hat{r} + \delta \hat{r}$.

Для оценки точности вычислений найдены энергии и волновые функции нескольких нижайших связанных состояний атома водорода ($\alpha=1$) в (1). В этом случае известно точное аналитическое решение задачи [1, 2]. Энергии уровней (собственные значения) равны

$$E_n = -\frac{1}{n^2}, n=1, \dots$$
 Собственные функции (радиальные волновые функции) двух нижайших

состояний с $l=0$ имеют вид: $R_{10} = 2e^{-r}$, $R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{-r/2}(1-r/2)$ (здесь первый индекс – глав-

ное квантовое число n , второй – l [1, 2]). Вычисленные значения энергий и собственных функций близки к точным с высокой точностью, в частности, для указанных состояний верными являются 14 значащих цифр в собственных значениях и 12 – в собственных функциях (подробное сравнение вычисленных и точных величин см. в разделе 3.2).

3.2. Задача на собственные значения на конечном отрезке

В данном разделе рассматривается следующая сингулярная задача на собственные значения для уравнения (1) на конечном отрезке $r \in [0, r_0]$: нужно найти такие значения параметра E , при которых $|R_{nl}(0)| < \infty$; нужно также найти решения (1), соответствующие этим собственным значениям E , и нормированные условием:

$$\int_0^{r_0} R_{nl}^2(r) r^2 dr = 1 \quad (24)$$

Отметим, что к решению такой задачи на собственные значения сводится (в простой модели) задача о состояниях водородоподобного донора, расположенного в центре полупроводниковой сферической квантовой точки (КТ) (полупроводниковый шар малого (~ 10 нм) радиуса в диэлектрической матрице, см., например, [10]).

Задачу на собственные значения в этом случае следует решать численно – аналитическое решение можно найти только при тех значениях r_0 , когда узел собственной функции задачи на бесконечном полуинтервале совпадает с радиусом КТ [10]. В данном случае, процедура вычисления собственных значений сводится к численному решению уравнения

$$R_l^R(r=r_0, E) = 0, \quad (25)$$

где R_l^R - это регулярные при $r=0$ решения (3). Для определённости, при вычислениях полагаем $a_l = 1$ в (4). После определения некоторого собственного значения E_0 , равенства (3) и (4) дают выражения для ненормированного решения. Для получения нормированной собственной функции нужно вычислить интеграл в левой части (24) от полученного решения (назо-

вём его Q), тогда нормированное решение даётся выражениями (3), (4) с $a_l = 1/\sqrt{Q}$. Интегрирование в левой части (24) с функцией (3) даёт

$$Q = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{a_n a_m}{(n+m+3)} r_0^{n+m+3}. \quad (26)$$

В Таблице 1 представлены результаты расчёта зависимости величин трёх наименьших собственных значений $E = E_{nl}$ (индекс n соответствует таковому для задачи на бесконечном полуинтервале $0 \leq r < \infty$) от радиуса КТ r_0 . Из таблицы, в частности, видно, что индекс n («главное квантовое число») при конечных r_0 уже не нумерует состояния: вырождение состояний с $n = 2, l = 0, 1$ снимается.

Таблица 1. Зависимость энергий трёх нижайших кулоновских состояний от r_0

r_0	$E_{1,0}$	$E_{2,0}$	$E_{2,1}$
∞	-1	-0,25	-0,25
15	-0,9999999998	-0,2490	-0,2495
10	-0,999998	-0,2256	-0,2377
9	-0,999991	-0,2057	-0,2275
8	-0,99995	-0,1695	-0,2089
7	-0,9997	-0,1025	-0,1750
6	-0,9986	0,0255	-0,1111
5	-0,9928	0,2825	0,01520
4	-0,9665	0,8405	0,2871
3	-0,8479	2,223	0,9625
2	-0,2500	6,655	3,152
1,8	0,06510	8,622	4,131
1,6	0,5426	11,42	5,530
1,4	1,294	15,59	7,614
1,2	2,539	22,12	10,89
1	4,748	33,14	16,45

Как отмечено выше, аналитическое решение задачи для конечного отрезка можно найти тогда, когда узел собственной функции задачи на бесконечном полуинтервале совпадает с радиусом КТ. Из Таблицы 1 видно, что при $r_0 = 2$ вычисленное наименьшее собственное значение (энергия основного состояния) есть $E_{10} = -0,25$ (с высокой точностью – по крайней мере 14 верных значащих цифр). Этому значению соответствует, в частности, решение $R(r) = Ce^{-r/2}(1 - r/2)$ (1) (ему соответствует также решение (1) $R(r) = Ce^{-r/2}r$), которое и имеет узел при $r = 2$, т.е. это и есть соответствующая собственная функция, нормированная условием (24), если положить $C = 1/\sqrt{Q}$, где $Q = 2 - 14e^{-2}$. Точность метода можно оценить, в частности, сравнивая значение величины Q , вычисленное с помощью выражения (26): $Q = 0.105306034687423$ и с помощью точной формулы $Q = 2 - 14e^{-2} = 0.105306034687422$. Сравнение точных и найденных с помощью описанного метода значений собственной функции показывает совпадение 14 значащих цифр в этих величинах при всех r : $0 \leq r \leq 2$.

3.3. Волновая функция основного состояния в модели центрально-ячеечного потенциала нулевого радиуса

Модель центрально-ячеечного потенциала нулевого радиуса описывает влияние короткодействующего потенциала, создаваемого примесным атомом в полупроводнике (помимо куло-

новского потенциала), на основное состояние в кулоновском потенциале [3]. Математически это означает следующее: нужно найти нормируемое условием (21) решение уравнения (1), соответствующее некоторому заданному значению $E = E_0 < 0$, не равному собственному значению (1). Ясно, что такое решение есть линейная комбинация регулярного (3) и иррегулярного (5) решений

$$R_{lrs}(r) = R_l^R(r) + MR_l^I(r) \quad (27)$$

при $l = 0$ (поскольку $R_l^I(r)$ ведёт себя в нуле как r^{-l-1}), экспоненциально убывающая на бесконечности. Задача состоит в отыскании константы M при заданном E_0 . Для этого нужно провести сшивку решений, т.е. найти нетривиальное решение уравнения (22), в котором матрица A и вектор χ есть функции M , а столбец $\Phi_0 = \Phi_0(M)$ составлен из значений, принимаемых (27) и его производной ($b_{-1} = 1$, $a_0 = 2 b_{-1}$) в точке $r = \hat{r}$ при данном M . Процедура вычисления M при заданном E_0 сводится к численному решению уравнения $\det A(M) = 0$.

После определения собственного значения M при данном E_0 , решая (22), находим связь между компонентами вектора $\chi(M)$, а затем, используя (21), - значения констант $C_2(M)$ и $b_{-1}(M)$, чем полностью определяем волновую функцию и её производную.

На рис. 1 представлена вычисленная зависимость коэффициента M в линейной комбинации регулярного и иррегулярного решений (1) от энергии E .

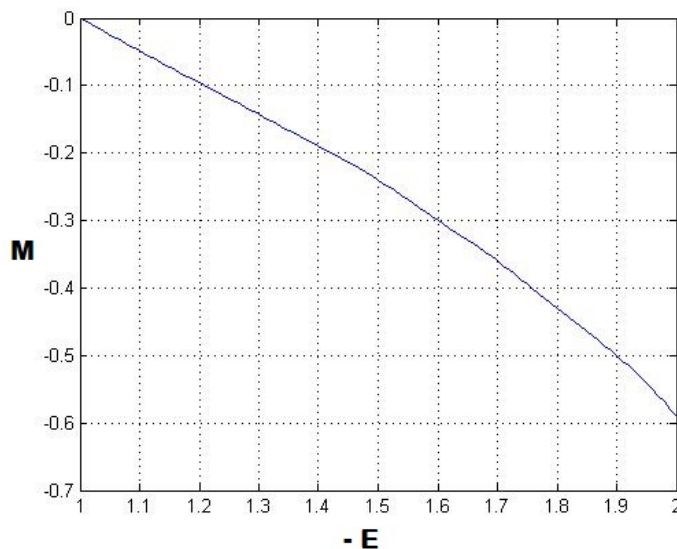


Рис.1. Зависимость коэффициента M в (27) от параметра E (энергии) в (1)

3.4. Задача на собственные значения в случае потенциала с жёсткой сердцевиной и кулоновским «хвостом»

Модели, использующие потенциал с жёсткой сердцевиной (hardcore potential), рассматриваются в различных приложениях, а методы решения задач квантовой механики при его наличии представляют собой самостоятельный интерес [11]. Модель потенциала с жёсткой сердцевиной и кулоновским хвостом может быть полезна для описания слабосвязанных состояний многоэкситонных комплексов, связанных на примеси в полупроводнике.

Рассматривается следующая задача на собственные значения для уравнения (1): нужно найти такие значения параметра E : $E < 0$ (энергии), при которых решение (1) $R_l(r) = 0$ при $r \leq r_{нс}$ ($r_{нс}$ – радиус действия потенциала с жёсткой сердцевиной) и $R_l(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$; нужно также найти решения, соответствующие этим собственным значениям E , и нормированные условием:

$$\int_{r_{HC}}^{\infty} R_l^2(r) r^2 dr = 1. \quad (28)$$

Для решения задачи необходимо при каждом значении E в (1) найти такую линейную комбинацию регулярного (3) и иррегулярного (5) решений, вида (27), для которой выполняется условие

$$R_{lrs}(r_{HC}) = R_l^R(r_{HC}) + M(E)R_l^I(r_{HC}) = 0. \quad (29)$$

Равенство (29) определяет зависимость $M = M(E)$, что позволяет сшить решения (см. пп. 3.1., 3.3.) и вычислить как собственные значения (энергии), так и собственные функции, удовлетворяющие условию нормировки (28).

Некоторые результаты расчётов представлены на рис. 2, 3. На рис. 2 представлена собственная функция, соответствующая наименьшему собственному значению (волновая функция основного состояния) в случае $r_{HC} = 0,4$ ($l = 0$, $E = -0,5320$). Зависимость величины наименьшего собственного значения ($l = 0$) от r_{HC} представлена на рис. 3.

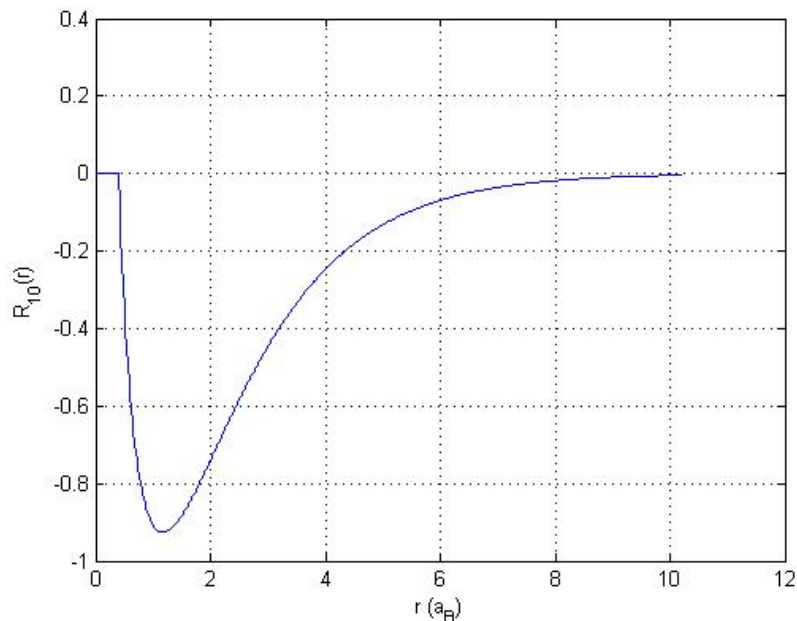


Рис. 2. Волновая функция основного состояния в случае радиуса потенциала $r_{HC} = 0,4$ ($l = 0$, $E = -0,5320$)

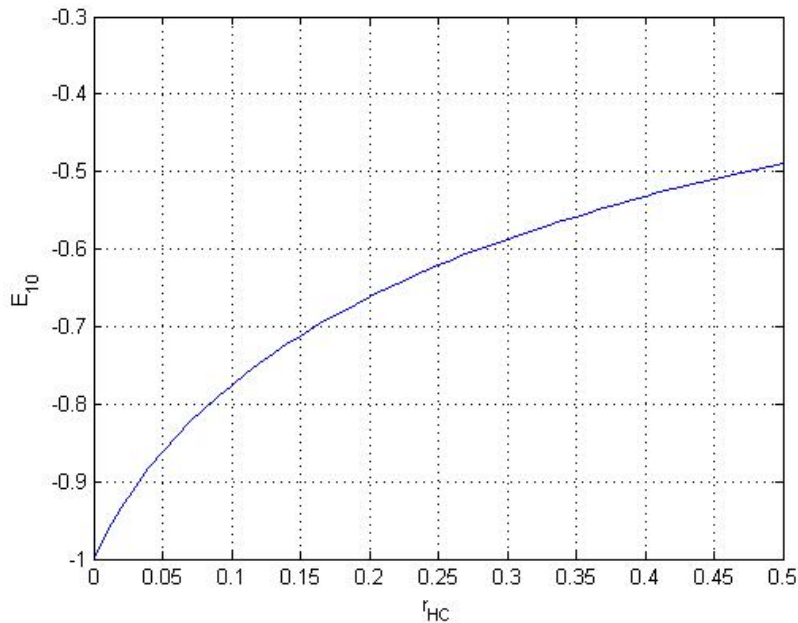


Рис. 3. Зависимость величины наименьшего собственного значения ($l = 0$) от r_{HC}

Автор благодарен Т.Ю. Балыковой за проведение численных расчётов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1989.
2. Мессиа А. Квантовая механика. – М.: Наука, Т.1, 1978.
3. Polupanov A.F., Kogan Sh.M. Lines intensities in shallow acceptor spectra in germanium. – Sov. Phys. Semicond. 1979, 13 (12), pp. 1368-1371.
4. Pajot B., Beinikhes I.L., Kogan Sh.M., Novak M.G. Polupanov A.F., Song C. The interpretation of the $p_{3/2}$ spectra of group III acceptors in silicon. – Semicond. Sci. Technol. 1992, 7, pp. 1162-1169.
5. Polupanov A.F., Galiev V.I., Zhuravlev V.E. – Materials Science Forum. 1990, 65&66, pp. 41-46.
6. Galiev V.I., Polupanov A.F., Shparlinski I.E. On the construction of solutions of systems of linear ordinary differential equations in the neighbourhood of a regular singularity. – J. of Computational and Applied Mathematics, 1992, v. 39, pp. 151 - 163.
7. Galiev V.I., Polupanov A.F., Accurate solutions of coupled radial Schrödinger equations. – J. Phys. A: Math. Gen., 1999, v. 32, pp. 5477-5492.
8. Федорюк М.В. Асимптотические методы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. – М.: Наука, 1985.
9. Wasow W. Asymptotic expansions for ordinary differential equations. – New York, London, Sydney: Interscience Publishing, 1965.
10. Polupanov A.F., Galiev V.I., Novak M.G. Effect of the spin-orbit interaction on the optical spectra of an acceptor in a semiconductor quantum dot. – Semiconductors, 1997, 31 (11), pp. 1185-1191.
11. Yamasaki Sh. A new method for treating the hard core potential, – Progress of Theoretical Physics. 2006, 115 (1), pp. 89-114.