

О ВЛИЯНИИ ТОЛЩИНЫ ПЛЕНКИ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ НА СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НАД ЕЕ ПОВЕРХНОСТЬЮ

А. Б. Петрин*

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 31 июля 2008 г.

Рассмотрена задача нахождения энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью пленки жидкого гелия под действием сил электростатического притяжения индуцированных зарядов. Показано, что при уменьшении толщины пленки на силы притяжения электронов к свободной поверхности жидкости начинают дополнительно влиять силы притяжения к зарядам, индуцированным на поверхности проводника, расположенного под пленкой. Когда толщина пленки становится меньше 10 мкм, это влияние приводит к значительному увеличению разности энергий между нижними уровнями и уменьшению их глубины. Предложен численный метод решения задачи и приведены результаты расчетов энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью жидких пленок ^3He , ^4He и неона. Рассмотрено влияние прижимающего электрического поля на энергетический спектр.

PACS: 73.20.-г, 61.25.Bi, 03.67.Lx

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление локализации электронов над свободной поверхностью некоторых сжиженных инертных газов (например, ^3He , ^4He и Ne) и твердых водорода и неона хорошо изучено теоретически [1, 2] и экспериментально [3–8]. Локализация обусловлена, с одной стороны, слабыми силами электростатического притяжения электрона к индуцированным зарядам на поверхности диэлектрической жидкости, а с другой, — силами отталкивания, которые возникают из-за обменного взаимодействия электрона с атомами поверхности. Потенциальный барьер по преодолению сил отталкивания для жидкого гелия составляет величину порядка 1 В. Эта величина достаточно велика, и поэтому при теоретическом анализе спектра электронов справедливо полагают, что потенциальный барьер со стороны жидкости бесконечно велик [9].

В последнее десятилетие стало ясно, что двумерный газ электронов, локализованных у поверхности жидкого гелия, твердого неона и водорода, может найти новое замечательное применение в об-

ласти квантовых вычислений [10–13]. Однако при миниатюризации элементов новых устройств толщина пленки (например, жидкого ^3He [13]), расположенной над проводящими элементами, с необходимостью должна уменьшаться.

Так как поляризуемость жидкого гелия и всех перечисленных выше веществ, пригодных для поверхностной локализации электронов, весьма мала, можно предположить, что поляризационные заряды на поверхности проводника под пленкой будут существенно влиять на притяжение электрона к поверхности даже при относительно большой толщине пленки. В настоящей работе количественно рассматривается вопрос о том, как уменьшение толщины пленки скажется на энергетическом спектре электронов.

2. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ. ОБЩАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В случае, когда электрон находится у поверхности пленки (для определенности жидкого гелия) бесконечной толщины, задача нахождения спектра легко решается. У задачи имеется выделенное направ-

*E-mail: a_petrin@mail.ru

ление перпендикулярно поверхности (ось z). Поэтому в уравнении Шредингера для собственных значений переменные разделяются, и решение уравнения дает, что спектр электрона состоит из двух составляемых, одно из которых описывает непрерывный спектр, связанный с движением электрона параллельно поверхности жидкости, а второе — дискретный спектр:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{mQ^2}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad (1)$$

$$n = 1, 2, \dots,$$

где \mathbf{k} — двумерный волновой вектор, параллельный поверхности, $Q = (\epsilon - 1)/4(\epsilon + 1)$, ϵ — диэлектрическая проницаемость жидкости, m — масса электрона, e — элементарный заряд, ϵ_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума.

Одномерное уравнение Шредингера для стационарных состояний, определяемых перпендикулярными поверхности перемещениями, в общем случае имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - U(z)\psi = -E\psi. \quad (2)$$

Это уравнение определяет дискретную часть спектра электронов. Координата z меняется от нуля на поверхности жидкости до бесконечности далеко от нее. Граничные условия для ψ можно записать в виде $\psi|_{z \rightarrow +0} = 0$ и $\psi|_{z \rightarrow +\infty} = 0$. В случае, когда все полупространство заполнено гелием, выражение для потенциальной энергии электрона имеет вид $U(z) = -e^2Q/4\pi\epsilon_0 z$. Решением уравнения (2) в этом случае является дискретная часть спектра (1).

Приведенное выражение для потенциальной энергии электрона получается хорошо известным методом зеркальных отображений. Однако если мы рассмотрим пленку жидкого гелия конечной толщины, под которой находится проводник (рис. 1), применение метода зеркальных отражений становится крайне сложным. В настоящей работе для вычисления потенциальной энергии электрона над пленкой применим другой метод, восходящий к Зоммерфельду [14] и, например, детально изложенный (хотя и применительно к несколько другой физической задаче) в работе [15].

3. НАХОЖДЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНА НАД ПЛЕНКОЙ

Рассмотрим (рис. 1) элементарный единичный заряд с плотностью

$$q = \delta(x)\delta(y)\delta(z - d), \quad (3)$$

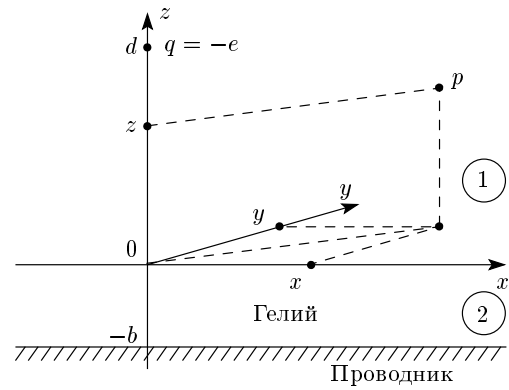


Рис. 1. Геометрия задачи и основные параметры задачи. Рассматривается электрон, локализованный над поверхностью пленки жидкого гелия на проводнике (p — точка наблюдения)

где $\delta(x)$ — дельта-функция, d — координата заряда по оси z . Пусть этот заряд расположен над пленкой (для определенности жидкого гелия) толщины b . Область $z > 0$ над поверхностью гелия будем называть областью 1 ($j = 1$), а область $z < 0$ внутри пленки — областью 2 ($j = 2$). Уравнения электростатики можно записать через потенциал φ_j в двух областях:

$$\Delta\varphi_j = -\frac{q}{\epsilon_j\epsilon_0}, \quad (4)$$

где Δ — оператор Лапласа, ϵ_j — относительная диэлектрическая проницаемость j -й области.

Граничные условия на свободной поверхности пленки требуют непрерывности тангенциальных составляющих полей \mathbf{E} , а также нормальных составляющих полей $\mathbf{D} = \epsilon\epsilon_0\mathbf{E}$. Граничное условие на поверхности проводника под пленкой — равенство нулю потенциала поверхности проводника.

Электрическое поле и потенциал можно представить в виде фурье-разложений:

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i(\xi x + \eta y)} \tilde{\mathbf{E}}(\xi, \eta, z),$$

$$\varphi(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i(\xi x + \eta y)} \tilde{\varphi}(\xi, \eta, z).$$

Аналогичное выражение можно написать для q :

$$q(x, y, z) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i(\xi x + \eta y)} \tilde{q}(\xi, \eta, z).$$

Используя преобразование Фурье, найдем фурье-образ распределения заряда (3):

$$\tilde{q}(\xi, \eta, z) = \delta(z - d). \quad (5)$$

С помощью фурье-представления полей уравнение (4) в двух областях можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \xi^2 - \eta^2\right) \tilde{\varphi}_j = -\frac{1}{\varepsilon_j \varepsilon_0} \delta(z - d), \quad j = 1, 2. \quad (6)$$

Уравнения (6) при фиксированных значениях ξ и η есть обыкновенные дифференциальные уравнения относительно переменной z . Задача состоит в нахождении из уравнений (6) функций $\tilde{\varphi}_j$ в рассматриваемых областях. По известному фурье-образу потенциала $\tilde{\varphi}_j$ составляющие $\tilde{\mathbf{E}}_j$ определяются выражениями

$$\tilde{E}_{jx} = -i\xi\tilde{\varphi}_j, \quad \tilde{E}_{jy} = -i\eta\tilde{\varphi}_j, \quad \tilde{E}_{jz} = -\partial\tilde{\varphi}_j/\partial z.$$

В области 1 уравнение (6) есть неоднородное уравнение

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \xi^2 - \eta^2\right) \tilde{\varphi}_1 = -\frac{1}{\varepsilon_1 \varepsilon_0} \delta(z - d).$$

Частным решением этого уравнения является функция

$$(\tilde{\varphi}_1)_p = \frac{\exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \eta^2}|z - d|\right)}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \sqrt{\xi^2 + \eta^2}}.$$

Общее решение уравнения имеет вид

$$\tilde{\varphi}_1 = S'_1 \exp\left(\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z\right) + S_1 \exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z\right) + \frac{\exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \eta^2}|z - d|\right)}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \sqrt{\xi^2 + \eta^2}},$$

где S_1 и S'_1 — постоянные коэффициенты.

Условие невозрастания решения при $z \rightarrow \infty$ дает $S'_1 = 0$. Следовательно, электрический потенциал в области 1 имеет вид

$$\tilde{\varphi}_1 = S_1 \exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z\right) + \frac{\exp\left(-\sqrt{\xi^2 + \eta^2}|z - d|\right)}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \sqrt{\xi^2 + \eta^2}}.$$

В области 2 существуют два линейно независимых решения (уравнение (6) в этой области однородно), поэтому

$$\tilde{\varphi}_2 = S'_2 \exp\left(\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z\right) + S_2 \exp\left[-\sqrt{\xi^2 + \eta^2}(z + h)\right],$$

где S_2 и S'_2 — постоянные коэффициенты.

Решение должно удовлетворять не только уравнениям, но и граничным условиям на двух границах сред: $z = 0$ (на первой границе) и $z = -b$ (на второй границе). Запишем условия непрерывности тангенциальных составляющих напряженностей электрического поля (\tilde{E}_{jx} , \tilde{E}_{jy}) и нормальной составляющей индукции электрического поля ($\varepsilon_j \tilde{E}_{jz}$) на границе $z = 0$ и условие равенства потенциала $\tilde{\varphi}_2$ нулю на границе $z = -b$. При $z = 0$ получим

$$\tilde{\varphi}_1|_{z=0} = \tilde{\varphi}_2|_{z=0}$$

— равенство тангенциальных составляющих электрического поля и

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \tilde{\varphi}_1}{\partial z} \Big|_{z=0} = \varepsilon_2 \frac{\partial \tilde{\varphi}_2}{\partial z} \Big|_{z=0}$$

— равенство нормальных компонент индукции. При $z = -b$ —

$$\tilde{\varphi}_2|_{z=-b} = 0$$

— равенство нулю потенциала на нижней границе.

Подставляя выражения для фурье-образов потенциалов в граничные условия, получаем

$$\begin{aligned} S_1 - S'_2 - e^{-\beta b} S_2 &= -\frac{\alpha e^{-\beta d}}{\beta}, \\ S_1 + \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} S'_2 - \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1} e^{-\beta b} S_2 &= \frac{\alpha e^{-\beta d}}{\beta}, \\ e^{-\beta b} S'_2 + S_2 &= 0, \end{aligned} \quad (7)$$

где для упрощения записи введены следующие обозначения: $\beta = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}$, $\alpha = 1/2\varepsilon_0\varepsilon_1$. Из системы уравнений (7) легко можно найти

$$S_1 = -\frac{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) - \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \beta [\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) + \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)]} e^{-\beta d}.$$

Тогда выражения для фурье-образа потенциала вне жидкости есть

$$\tilde{\varphi}_1 = \frac{e^{-\beta|z-d|}}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \beta} - \frac{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) - \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) + \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-\beta(d+z)}}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \beta}. \quad (8)$$

Сам потенциал в области 1, т. е. прообраз выражения (8), имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi(x, y, z) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i(\xi x + \eta y)} \times \\ &\times \left[\frac{e^{-\beta|z-d|}}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \beta} - \frac{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) - \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) + \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-\beta(d+z)}}{2\varepsilon_1 \varepsilon_0 \beta} \right]. \end{aligned}$$

Первый член в подинтегральном выражении соответствует потенциалу исходного заряда q , а второй член — потенциалу φ_{ind} индуцированных зарядов. Тогда потенциальная энергия единичного заряда, расположенного в точке $z = d$ в поле индуцированных им зарядов, равна

$$U(d) = \frac{\varphi_{ind}(0, 0, d)}{2} = -\frac{1}{16\varepsilon_1\varepsilon_0\pi^2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) - \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) + \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-2\beta d}}{\beta},$$

отсюда следует, что потенциальная энергия электрона с зарядом $-e$ в точке на расстоянии z от поверхности рассматриваемой диэлектрической пленки толщины b равна

$$U(z) = -\frac{e^2}{16\varepsilon_1\varepsilon_0\pi^2} \times \\ \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) - \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon_2 \operatorname{ch}(\beta b) + \varepsilon_1 \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-2\beta z}}{\beta}.$$

Учитывая, что с высокой точностью можно положить диэлектрическую проницаемость паров гелия равной единице, и обозначая относительную проницаемость жидкого гелия через ε , удобно выразить $U(z)$ через одномерный интеграл. В результате получим окончательное выражение для потенциальной энергии электрона в поле сил притяжения индуцированных зарядов на поверхности пленки и проводника:

$$U(z) = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 z} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon - \operatorname{th}(b\vartheta/2z)}{\varepsilon + \operatorname{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta. \quad (9)$$

При бесконечной толщине пленки (в пределе $b \rightarrow \infty$) выражение (9) переходит в известное из метода зеркальных изображений выражение для потенциальной энергии электрона вблизи полупространства, $U(z) = -e^2 Q / 4\pi\varepsilon_0 z$, о котором упоминалось выше.

Заметим, что предложенный метод вычисления потенциальной энергии электрона можно без труда обобщить на случай наличия n диэлектрических слоев, расположенных на плоской металлической поверхности. Для этого надо в каждом i -м слое представить фурье-образ потенциалов, например, в виде

$$\tilde{\varphi}_{i+1} = S'_{i+1} \exp \left[\sqrt{\xi^2 + \eta^2} (z + h_{i-1}) \right] + \\ + S_{i+1} \exp \left[-\sqrt{\xi^2 + \eta^2} (z + h_i) \right]$$

и записать граничные условия, аналогичные (7), на всех $n + 1$ границах (предполагается, что $h_0 = 0$). Из полученной системы уравнений можно найти S_1 и (аналогично приведенному выше выводу) $U(z)$.

4. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИИ

В уравнении Шредингера (2) для стационарных состояний применительно к рассматриваемой задаче переменная z меняется в интервале $0 < z < \infty$. Сделаем в (2) замену переменных [16] $z = \zeta D / (1 - \zeta)$, где D — характерная длина, которая будет определена ниже. Таким преобразованием интервал $0 < z < \infty$ отображается в интервал $0 < \zeta < 1$. После этой замены уравнение (2) примет вид

$$(1 - \zeta)^4 \frac{d^2 \psi}{d\zeta^2} - 2(1 - \zeta)^3 \frac{d\psi}{d\zeta} - \frac{2mD^2}{\hbar^2} V(\zeta) \psi = -\frac{2mD^2}{\hbar^2} E \psi,$$

где $V(\zeta) = U(\zeta / (1 - \zeta))$. Граничные условия для ψ будут $\psi|_{\zeta \rightarrow 0} = 0$ и $\psi|_{\zeta \rightarrow 1} = 0$.

Рассмотрим конечно-разностное представление полученного уравнения. Введем дискретизацию ζ_n и вектор-столбец ψ_n :

$$\zeta_n = nh, \quad \psi_n = \psi(\zeta_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, M + 1,$$

где шаг по оси ζ равен $h = 1 / (M + 1)$ и, в силу граничных условий, $\psi_0 = \psi_{M+1} = 0$. Конечно-разностную аппроксимацию производных в точке ζ_n примем в виде

$$\psi'(\zeta_n) \approx \frac{\psi_{n+1} - \psi_{n-1}}{2h} + O(h^2),$$

$$\psi''(\zeta_n) \approx \frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{h^2} + O(h^2).$$

Подставляя приведенные выше приближенные конечно-разностные выражения в стационарное уравнение Шредингера, получим

$$\frac{(1 - \zeta_n)^3 (\zeta_n - 1 - h)}{h^2} \psi_{n-1} + \\ + \left[\frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h^2} + \frac{2mD^2}{\hbar^2} V(\zeta_n) \right] \psi_n + \\ + \frac{(1 - \zeta_n)^3 (\zeta_n + h - 1)}{h^2} \psi_{n+1} = \lambda \psi_n,$$

где введено обозначение $\lambda = 2mD^2 E / \hbar^2$, а n меняется от 1 до M . В матричном виде данное уравнение примет вид матричного уравнения для собственных значений, $\sum_{j=1}^M A_{ij} \psi_j = \lambda \psi_i$, причем матрица A_{ij} трехдиагональная.

Представим потенциальную энергию в виде $V(\zeta) = W(D)f(\zeta)$, где $W(D)$ — характерная энергия задачи, которая есть функция характерной длины. Тогда уравнение для собственных значений примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{(1 - \zeta_n)^3(\zeta_n - 1 - h)}{h^2} \psi_{n-1} + \\ & + \left[\frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h^2} + \frac{2mD^2W(D)}{\hbar^2} f(\zeta_n) \right] \psi_n + \\ & + \frac{(1 - \zeta_n)^3(\zeta_n + h - 1)}{h^2} \psi_{n+1} = \lambda \psi_n. \end{aligned} \quad (10)$$

В полученном уравнении существует произвол в выборе характерной длины D . Выберем D таким образом, чтобы выполнялось равенство $2mD^2W(D)/\hbar^2 = 1$. Из уравнения (10) находим величину D и подставляем ее в выражение для λ . Получаем $\lambda = 2mD^2E/\hbar^2 = \alpha E$, причем коэффициент α уже не зависит от D . Опыт численного моделирования показал, что при таком выборе характерной длины матрица задачи оказывается хорошо обусловленной и применимы стандартные алгоритмы нахождения собственных значений.

Запишем теперь уравнение (10) для электрона вблизи диэлектрической пленки, расположенной над проводящим экраном. Потенциальная энергия электрона после замены переменных и несложных преобразований примет вид

$$V(\zeta) = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} \frac{\zeta - 1}{\zeta} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]}{\varepsilon + \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]} e^{-\vartheta} d\vartheta,$$

где $\delta = b/D$ — толщина пленки, выраженная в единицах характерной длины D . Полученное выражение можно записать в виде

$$V(\zeta) = W(D)f(\delta, \varepsilon, \zeta),$$

где

$$\begin{aligned} W(D) &= \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D}, \\ f(\delta, \varepsilon, \zeta) &= \frac{\zeta - 1}{\zeta} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]}{\varepsilon + \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]} e^{-\vartheta} d\vartheta. \end{aligned}$$

Из уравнения $2mD^2W(D)/\hbar^2 = 1$ найдем характерную длину и характерную энергию для данной задачи:

$$\begin{aligned} D &= \frac{\hbar^2}{2m} \frac{16\pi\epsilon_0}{e^2} = \frac{8\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 2a_B, \\ W &= \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} = \frac{e^2}{32\pi\epsilon_0 a_B} \approx 3.4014 \text{ эВ}, \end{aligned}$$

где a_B — боровский радиус электрона. Заметим, что такой выбор характерной длины и энергии с точностью до двойки эквивалентен кулоновым единицам, принятым при рассмотрении движения в кулоновом поле [17, § 36].

В результате уравнение для собственных значений уровней энергии в безразмерном виде примет вид

$$\begin{aligned} & \frac{(1 - \zeta_n)^3(\zeta_n - 1 - h)}{h^2} \psi_{n-1} + \\ & + \left[\frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h^2} + f(\delta, \varepsilon, \zeta_n) \right] \psi_n + \\ & + \frac{(1 - \zeta_n)^3(\zeta_n + h - 1)}{h^2} \psi_{n+1} = \lambda \psi_n. \end{aligned} \quad (11)$$

Представляя уравнение (11) в матричном виде и решая матричную задачу для собственных значений с помощью стандартных процедур, найдем собственные значения λ_i , а после этого размерные значения собственной энергии электрона по формуле

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2mD^2} \lambda_i = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} \lambda_i = W \lambda_i.$$

Нетрудно обобщить полученное решение для случая, когда на систему наложено прижимающее электрона однородное электрическое поле, параллельное оси z , с составляющей $E_z = E_0$ снаружи пленки. В этом случае потенциальная энергия электрона снаружи пленки имеет вид

$$\begin{aligned} U(z) &= e \left(\frac{E_0}{\varepsilon} b + E_0 z \right) - \\ & - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(b\vartheta/2z)}{\varepsilon + \text{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta. \end{aligned} \quad (12)$$

При получении уравнения (12) предполагалось, что поверхность металла под пленкой находится при нулевом потенциале, как и при выводе выражения (9), а однородное внешнее поле создается заряженной пластиной, расположенной в свободном пространстве параллельно поверхности пленки и составляющей вместе с пластиной металла под пленкой плоский конденсатор.

Потенциальная энергия электрона после описанной выше замены переменных и несложных преобразований принимает вид

$$\begin{aligned} V(\zeta) &= eE_0 D \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\zeta}{1 - \zeta} \right) + \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} \frac{\zeta - 1}{\zeta} \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]}{\varepsilon + \text{th}[\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta]} e^{-\vartheta} d\vartheta. \end{aligned}$$

Полученное выражение можно, как и выше, представить в виде $V(\zeta) = W(D)f(\delta, \chi, \varepsilon, \zeta)$, где

$$W(D) = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 D},$$

$$f(\delta, \chi, \varepsilon, \zeta) = \chi \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\zeta}{1-\zeta} \right) + \frac{\zeta-1}{\zeta} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}[\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta]}{\varepsilon + \text{th}[\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta]} e^{-\vartheta} d\vartheta.$$

Заметим, что влияние внешнего электрического поля E_0 определяется безразмерным коэффициентом $\chi = eE_0 D / W(D) = 16\pi\varepsilon_0 E_0 D^2 / e$.

Конечно-разностное представление стационарного уравнения Шредингера в безразмерном виде при наличии внешнего электрического поля, аналогичное уравнению (11), при условии $2mD^2W(D)/\hbar^2 = 1$ имеет вид

$$\frac{(1-\zeta_n)^3(\zeta_n-1-h)}{h^2} \psi_{n-1} + \left[\frac{2(1-\zeta_n)^4}{h^2} + f(\delta, \chi, \varepsilon, \zeta_n) \right] \psi_n + \frac{(1-\zeta_n)^3(\zeta_n+h-1)}{h^2} \psi_{n+1} = \lambda \psi_n. \quad (13)$$

5. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Численные расчеты были проведены для пленок жидкого гелия и неона. На рис. 2а показана зависимость абсолютных значений энергий двух нижних уровней в спектре электронов, локализованных над пленкой жидкого ^3He , от толщины пленки. Диэлектрическая проницаемость ^3He принималась равной $\varepsilon = 1.042764$ [18].

Рисунок 2а показывает, что когда толщина пленки уменьшается примерно до 10 мкм, энергетический спектр существенно меняется. Важно то, что хотя толщина пленки порядка микрометра кажется уже большой макроскопической величиной, не влияющей на спектр электронов, тем не менее даже при такой большой толщине пленки на спектр электронов существенно влияет расположенный под ней металл.

Аналогичные зависимости были вычислены для жидкого ^4He и жидкого неона (рис. 2б и 2в). Диэлектрическая проницаемость жидкого ^4He принималась равной $\varepsilon = 1.057$. Такое значение, соответствующее $Q = 1/144$, принималось в работах [2, 9] и

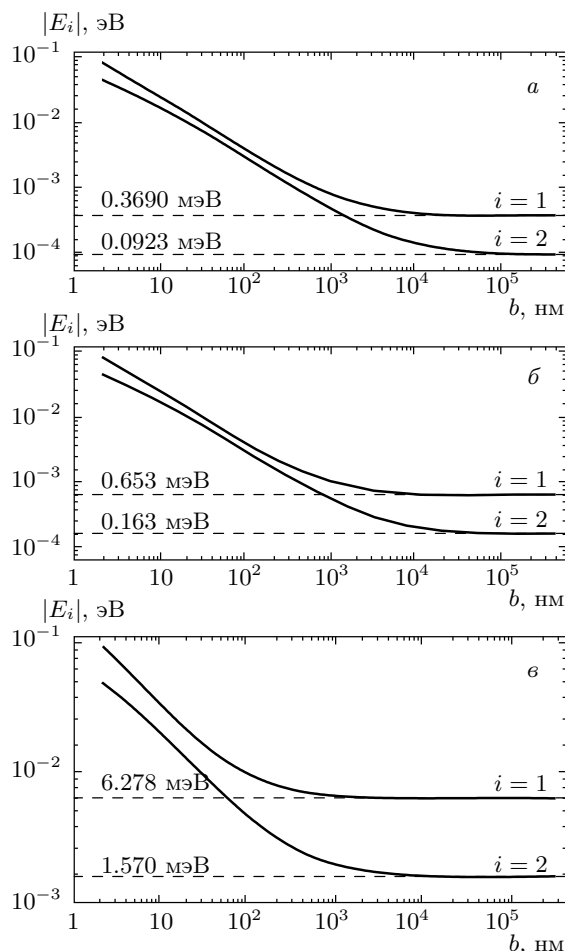


Рис. 2. Зависимость абсолютных значений энергий двух нижних уровней в спектре электронов, локализованных над пленками жидких ^3He (а), ^4He (б) и Ne (в), в зависимости от толщины пленки

кажется завышенным по сравнению с величинами, приводимыми в справочнике [19]. Диэлектрическая проницаемость жидкого неона принималась равной $\varepsilon = 1.188$.

Из сравнения представленных на рис. 2 кривых видно, что по мере увеличения поляризуемости жидкости толщина пленки, начиная с которой происходит заметное смещение энергетических уровней, уменьшается, так как вклад в силу притяжения поляризационных зарядов металла становится меньше. Кроме того, с увеличением поляризуемости абсолютное значение энергий двух первых уровней увеличивается. Это также естественно, так как при этом сила притяжения электрона к поверхности пленки возрастает.

На рис. 3 показано, как изменятся кривые на

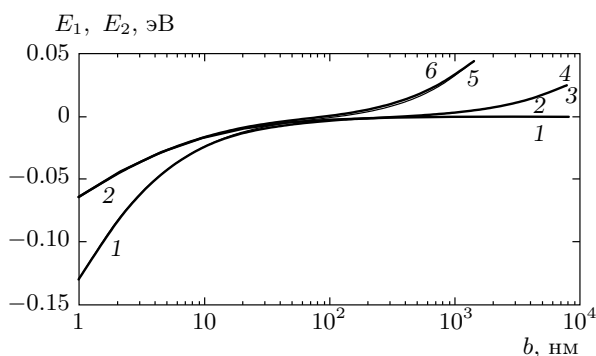


Рис. 3. Зависимость энергий двух нижних уровней в спектре электронов, локализованных над пленкой жидкого ^3He , от толщины пленки при различных величинах прижимающего поля: 1 и 2 — $E_0 = 0$ (те же кривые, что и на рис. 2а); 3 и 4 — $E_0 = 3.214 \text{ кВ/м}$ ($\chi = 10^{-7}$); 5 и 6 — $E_0 = 32.14 \text{ кВ/м}$ ($\chi = 10^{-6}$)

рис. 2а при наложении внешнего электрического поля. При увеличении толщины пленки энергии уровней увеличиваются, причем в пределе больших толщин — по линейному закону. Это связано с линейной зависимостью падения потенциала внешнего поля на пленке от ее толщины. При фиксированном прижимающем поле разность энергий уровней $\Delta E = E_2 - E_1$ при больших толщинах пленки не зависит от ее толщины, однако величина ΔE заметно растет при малой толщине пленки. Это иллюстрирует рис. 4, на котором показана зависимость разности энергий ΔE двух нижних уровней в спектре электронов от толщины пленки b при различных величинах внешнего электрического поля. С ростом электрического поля E_0 величина ΔE , при фиксированном значении толщины пленки b , увеличивается.

Из рис. 3 и 4 видно, что чем больше прижимающее поле, тем меньше толщина пленки, при которой начинается заметное влияние поля на уровни энергии и расстояние между ними. При малых толщинах пленки сила притяжения электрона к индуцированным зарядам в металле и пленке значительно превышает прижимающую силу внешнего электрического поля (по крайней мере, для рассматриваемого диапазона величин поля E_0). Ясно, что небольшие прижимающие поля не будут влиять на нижние уровни энергии электронов, локализованных у поверхности достаточно тонких пленок жидкого ^3He .

Сила притяжения электрона к индуцированным зарядам в металле и пленке увеличивается с уменьшением толщины пленки. Возникает вопрос: при каких толщинах пленки сила притяжения электро-

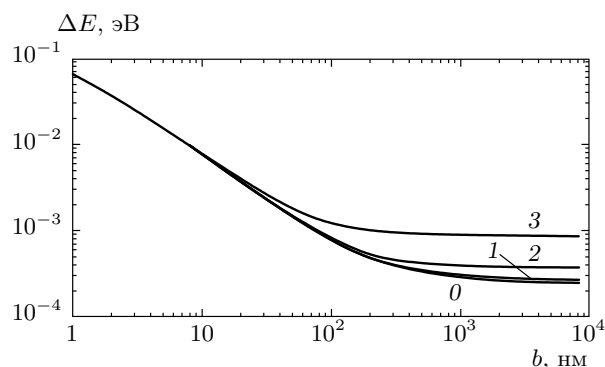


Рис. 4. Зависимость разности энергий $\Delta E = E_2 - E_1$ двух нижних уровней в спектре электронов, локализованных над пленкой жидкого ^3He , от толщины пленки при различных величинах прижимающего электрического поля: кривые 0 — нулевое поле; 1 — $E_0 = 0.3214 \text{ кВ/м}$ ($\chi = 10^{-8}$); 2 — $E_0 = 3.214 \text{ кВ/м}$ ($\chi = 10^{-7}$); 3 — $E_0 = 32.14 \text{ кВ/м}$ ($\chi = 10^{-6}$)

нов к поверхности тонких пленок будет настолько большой, что поверхность будет испытывать деформации, существенно влияющие на энергетический спектр? Предложенная ранее модель не учитывает деформации поверхности жидкости под действием притягивающих электрон сил. Чтобы оценить воздействие деформаций на энергетический спектр электронов и найти факторы, влияющие на величину этих деформаций, а также определить границы применимости приведенной выше теории, была предложена следующая приближенная модель.

6. ПРИБЛИЖЕННАЯ МОДЕЛЬ

Для приближенного описания задачи нахождения энергетического спектра электронов у поверхности тонкой пленки жидкого гелия был использован подход работы [20]. Согласно этому подходу электрон, локализованный в пространстве с характерным размером ξ , будет иметь минимальную кинетическую энергию равную $K_{min} \sim \hbar^2/2m\xi^2$. Электрон будет пытаться улететь из этого пространства, если его не удерживать некоторой силой. Эта удерживающая электрон сила должна быть равна $-dK_{min}/d\xi = \hbar^2/m\xi^2$ («сила Шредингера»).

Пусть в рассматриваемой нами задаче электронное облако у пленки жидкого гелия имеет характерный размер ξ по оси z (рис. 5). Будем пренебрегать отличием диэлектрической проницаемости пленки от единицы, так как при малых толщинах пленки за-

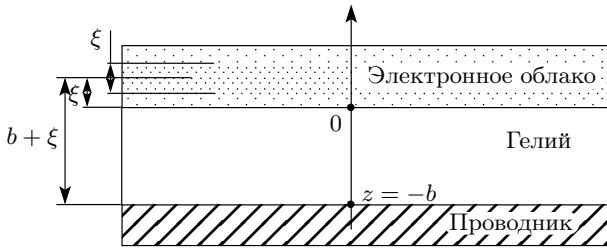


Рис. 5. Электронное облако у поверхности пленки жидкого гелия

ряды, индуцированные электроном в металле, определяют притяжение электрона к пленке. Тогда на электрон действуют сила притяжения к индуцированным зарядам металла подложки (равна силе притяжения к зеркальному отражению электрона) и сила притяжения со стороны внешнего электрического поля:

$$F_e \sim \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_0.$$

Приравнявая эту силу «силе Шредингера», получим уравнение для определения ξ :

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_0 - \frac{\hbar^2}{m\xi^3} = 0. \quad (14)$$

Очевидно, что полученное уравнение можно представить как условие минимума полной энергии электрона:

$$E_1 \sim -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + eE_0(b + \xi). \quad (15)$$

Решая уравнение (14) относительно ξ и подставляя полученное выражение в (15), получим энергию первого (нижнего) уровня.

Для нахождения второго уровня можно применить подобные рассуждения. Для второго уровня волновая функция имеет два узла, поэтому $K_2 \sim 2\hbar^2/m\xi^2$. Тогда уравнение баланса сил, действующих на электрон, аналогичное (14), для второго уровня примет вид

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_0 - \frac{4\hbar^2}{m\xi^3} = 0. \quad (16)$$

Энергия второго уровня находится из уравнения

$$E_2 \sim -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)} + \frac{2\hbar^2}{2m\xi^2} + eE_0(b + \xi). \quad (17)$$

Результаты вычислений зависимостей $\Delta E(b)$, полученные по формулам (14)–(17) для тех же значе-

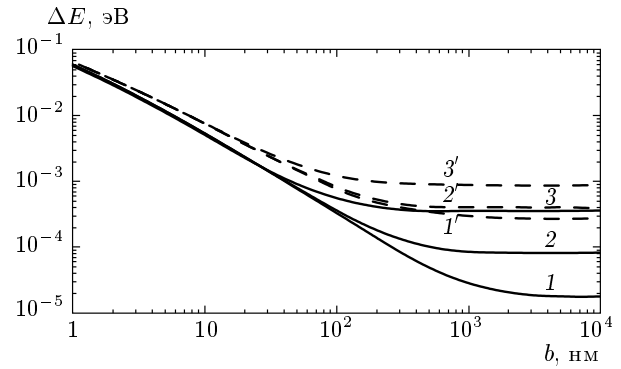


Рис. 6. Зависимость разности энергий $\Delta E = E_2 - E_1$ двух нижних уровней, рассчитанная по приближенной модели, от толщины пленки при тех же величинах прижимающего электрического поля, что на рис. 4. Штриховыми линиями и цифрами со штрихом показаны аналогичные кривые рис. 4

ний прижимающего поля, что в случае рис. 5, представлены на рис. 6. Видно, что хотя имеются некоторые расхождения со строгими расчетами, приближенная теория вполне удовлетворительна для оценок. В частности, она дает примерно те же значения b , соответствующие началу существенного влияния прижимающего поля на спектр.

Оценим теперь деформацию поверхности жидкости из-за давления на нее электрона. В частности, нас будет интересовать, при каких толщинах пленки нельзя пренебрегать этой деформацией и пользоваться приведенной выше теорией.

Пусть, для простоты, лунка на поверхности жидкости имеет сферическую форму и поверхностное натяжение жидкости равно σ . Пусть, кроме того, ρ — глубина лунки, L — диаметр ее края, R_d — радиус кривизны лунки. Тогда нетрудно показать, что при малой деформации $\rho \ll R_d$ эти величины связаны уравнением $R_d \approx L^2/8\rho$.

Приравнявая силу притяжения электрона к поверхности компенсирующей ее силе поверхностного натяжения, получим уравнение

$$\frac{\pi L^2}{4} \frac{2\sigma}{R_d} = \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_0,$$

из которого, используя связь $R_d \approx L^2/8\rho$, получим величину деформации:

$$\rho = \frac{1}{4\pi\sigma} \left[\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_0 \right].$$

На рис. 7 показана зависимость $\rho(b)$ для двух нижних уровней энергии при таких малых b , что

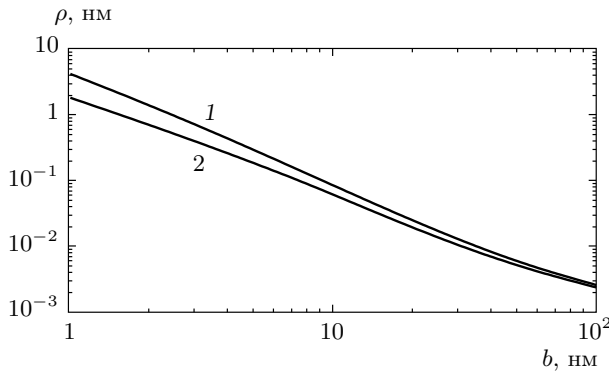


Рис. 7. Зависимость деформации ρ от толщины пленки b при малом прижимающем поле и малых значениях b для первого (кривая 1) и второго (кривая 2) уровней энергии

влиянием прижимающего поля можно пренебречь ($E_0 = 32.14$ кВ/м). Величина коэффициента поверхностного натяжения принималась равной $\sigma = 3 \cdot 10^{-4}$ Н/м. Из рис. 7 видно, что при толщинах пленки менее 10 нм ее деформация сравнима с толщиной пленки, и при расчете уровней энергии деформацией пленки пренебрегать нельзя.

Действительно, зная зависимость $\rho(b)$, можно найти скорректированные уровни энергии по формулам

$$E_{1\text{ corr}} \sim -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b-\rho+\xi)} + \frac{\hbar^2}{2m\xi^2} + eE_0(b-\rho+\xi),$$

$$E_{2\text{ corr}} \sim -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b-\rho+\xi)} + \frac{2\hbar^2}{m\xi^2} + eE_0(b-\rho+\xi).$$

На рис. 8 показана зависимость разности энергий $\Delta E = E_2 - E_1$ двух нижних уровней в спектре от толщины пленки b при $E_0 = 32.14$ кВ/м ($\chi = 10^{-6}$) и скорректированную разность энергий $\Delta E_{\text{corr}} = E_{2\text{ corr}} - E_{1\text{ corr}}$ как функцию b . Видно, что при $b < 10$ нм деформацией пленки при расчете уровней энергии пренебрегать нельзя.

Мы можем подтвердить наши оценки, записав условие возникновения (в результате значительной деформации поверхности жидкости) пузыря с электроном внутри («баблона»). В нашем случае, когда сила притяжения полностью определяется индуцированными зарядами, для некоторой критической величины b_{cr} можно записать условие приближенного равенства силы притяжения и поверхностной силы, возникающей при образовании полусферической лунки. Учитывая уравнение (14) для слабого электрического прижимающего поля, получим систему уравнений

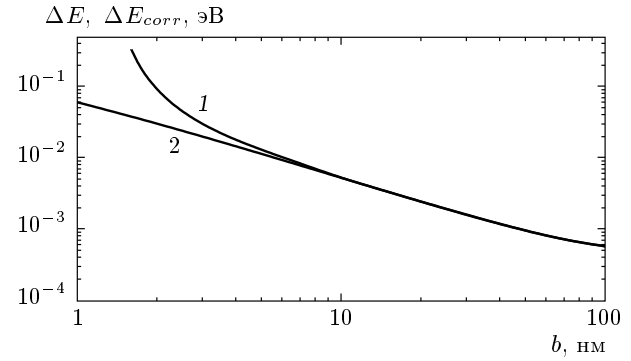


Рис. 8. Разность энергий $\Delta E = E_2 - E_1$ двух нижних уровней в спектре в зависимости от толщины пленки b в диапазоне, где влияние прижимающего электрического поля мало (кривая 1), и зависимость $\Delta E_{\text{corr}}(b)$ с учетом деформации поверхности пленки (кривая 2)

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b_{cr} + \xi)^2} = \frac{\pi L^2}{4} \frac{2\sigma}{R_d},$$

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b_{cr} + \xi)^2} - \frac{\hbar^2}{m\xi^3} = 0,$$

где $R_d = \xi/2$ и $L = \xi$. Решая данную систему уравнений, получим

$$b_{cr} = \left(\frac{\hbar^2}{\pi\sigma m}\right)^{3/8} \sqrt{\frac{e^2 m}{16\pi\epsilon_0 \hbar^2}} - \left(\frac{\hbar^2}{\pi\sigma m}\right)^{1/4} \approx 3.8 \text{ нм}.$$

Это значение хорошо согласуется с нашими предыдущими оценками.

Определим теперь критическое прижимающее поле E_{cr} , при котором поле начинает существенно влиять на уровни энергии задачи. Величину E_{cr} можно определить, приравняв силу притяжения к индуцированным зарядам силе, возникающей за счет прижимающего поля:

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} = eE_{cr}.$$

Учитывая уравнение (14), получим систему уравнений

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} = eE_{cr},$$

$$\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0(b + \xi)^2} + eE_{cr} - \frac{\hbar^2}{m\xi^3} = 0,$$

из которой нетрудно найти зависимость $E_{cr} = E_{cr}(b)$. Простая аналитическая формула получается для обратной функции

$$b(E_{cr}) = \sqrt{\frac{e}{16\pi\epsilon_0 E_{cr}}} - \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m e E_{cr}}}.$$

Из полученной зависимости следует, что при толщинах пленки менее 100 нм и напряженности поля менее примерно 10^6 В/м поле не будет существенно влиять на уровни энергии.

Следует отметить не упомянутые ранее предположения, которые были использованы при построении приведенной выше теоретической модели. Во-первых, считалось, что электроны не туннелируют через пленку в металл, по крайней мере, время жизни электрона на поверхностном уровне достаточно велико. При толщине пленки $b \lesssim 10$ нм это приближение кажется уже сомнительным, и этот вопрос требует дальнейшего исследования. Во-вторых, на поверхности жидкости существует переходный слой порядка нескольких атомных расстояний. Предполагалось, что он не влияет на спектр. В-третьих, высота потенциального барьера со стороны жидкости считалась бесконечной. В-четвертых, не рассматривались вопросы о возможности разрыва пленки под действием тепловых флуктуаций и влиянии флуктуаций толщины пленки на время жизни электрона и время жизни возбужденных состояний, которое существенно для квантовых вычислений [13].

Наконец, следует особо отметить предположение о применимости электростатики при вычислении потенциальной энергии электрона. Из приведенных выше приближенных оценок можно показать, что средняя кинетическая энергия электрона в данной задаче менее 0.05 эВ, что значительно ниже характерных энергий Ферми для металлов. Поэтому разумно предположить, что электростатическое равновесие действительно успевает устанавливаться при движении электрона.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен теоретический анализ энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью пленки жидкого гелия под действием сил электростатического притяжения индуцированных зарядов и прижимающего поля. Проведенный анализ показал, что при уменьшении толщины пленки на силы притяжения электронов к свободной поверхности жидкости начинают дополнительно влиять силы притяжения к зарядам, индуцированным на поверхности проводника, расположенного под пленкой. Показано, что это влияние существенно при толщине пленки менее 10 мкм. Указанное влияние приводит к значительному увеличению разности энергий между нижними уровнями и уменьшению их глубины. Предложенный анализ

применим к анализу энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью других пленок электроотрицательных материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. W. Cole, Phys. Rev. B **2**, 4239 (1970).
2. M. W. Cole, Rev. Mod. Phys. **46**, 451 (1974).
3. А. П. Володин, В. С. Эдельман, Письма в ЖЭТФ **30**, 668 (1979).
4. C. C. Grimes and T. R. Brown, Phys. Rev. Lett. **32**, 280 (1974).
5. C. C. Grimes, T. R. Brown, M. L. Burns, and C. L. Zipfel, Phys. Rev. B **13**, 140 (1976).
6. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Наука, Москва (1989).
7. А. М. Трояновский, А. П. Володин, М. С. Хайкин, Письма в ЖЭТФ **29**, 65 (1979).
8. А. М. Трояновский, М. С. Хайкин, ЖЭТФ **54**, 214 (1981).
9. A. G. Khrapak, W. F. Schmidt, and E. Illenberger, in *Electronic Excitations in Liquefied Rare Gases*, ed. by W. F. Schmidt and E. Illenberger, Amer. Sci. Publ., Stevenson Ranch (2005), p. 239.
10. I. I. Smolyaninov, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2075 (2001).
11. I. I. Smolyaninov, Phys. Rev. Lett. **85**, 2861 (2000).
12. P. M. Platzman and M. I. Dykman, Science **284**, 1967 (1999).
13. A. J. Dahm, J. M. Goodkind, I. Karakurt, and S. Pilla, J. Low Temp. Phys. **126**, 709 (2002).
14. A. Sommerfeld, Ann. der Phys. **81**, 1135 (1926).
15. А. Б. Петрин, ЖЭТФ **134**, 436 (2008).
16. M. S. Stern and A. E. A. Warburton, J. Phys. A **5**, 112 (1972).
17. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1989).
18. H. A. Krierstead, J. Low Temp. Phys. **24**, 497 (1976).
19. А. П. Бабичев, Н. А. Бабушкина, А. М. Братковский, *Физические величины: справочник*, Энергоатомиздат, Москва (1991).
20. V. F. Weisskopf, Amer. J. Phys. **53**, 206 (1985).