Волновые функции и энергии связанных электронных состояний над жидким гелием

Т.И. Зуева, С.С. Соколов

Физико-технический институт низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины пр. Ленина, 47, г. Харьков, 61103, Украина E-mail: zueva@ilt.kharkov.ua

Статья поступила в редакцию 6 июня 2011 г., после переработки 12 сентября 2011 г.

Методом разложения в ряд решены волновые дифференциальные уравнения и найдены собственные значения энергии и волновые функции первых двух поверхностных состояний электронов над жидким гелием в интервале прижимающих электрических полей 0 В/см < E_⊥ < 3000 В/см. С использованием модельного потенциала для сил изображения и с учетом конечности потенциального барьера для проникновения электрона в жидкость определены значения волновых функций на границе раздела жидкостьпар. Путем сравнения полученных результатов с приближенными значениями, полученными с помощью волновых функций, определяемых вариационным методом, показана достаточная точность этого метода при вычислении матричных элементов электрон-риплонного рассеяния.

Методом розкладання в ряд вирішені хвильові диференціальні рівняння й знайдені власні значення енергії та хвильові функції перших двох поверхневих станів електронів над рідким гелієм в інтервалі притискуючих електричних полів 0 В/см < E₁ < 3000 В/см. З використанням модельного потенціалу для сил зображення та з урахуванням скінченності потенційного бар'єра для проникнення електрона в рідину визначені значення хвильових функцій на границі розділу рідина-пар. Шляхом порівняння отриманих результатів з наближеними значеннями, які отримані за допомогою хвильових функцій, що обчислюються за допомогою варіаційного методу, показана достатня точність цього методу при обчисленні матричних елементів електрон-риплонного розсіювання.

PACS: 73.20.-r Электронные состояния на поверхностях и границах раздела.

Ключевые слова: жидкий гелий, поверхностные электронные состояния, границы раздела фаз.

Введение

Одна из привлекательных особенностей системы поверхностных электронов (ПЭ), локализованных над границей раздела пар-жидкий гелий, — возможность весьма точного теоретического описания их энергетического спектра. Потенциальную энергию электрона $U_{e}(z)$ обычно моделируют приближением

$$U_e(z) \simeq U^{\infty}(z) = \begin{cases} \infty; & z \le 0\\ v(z) = v_0(z) = -\frac{\Lambda_0}{z} + eE_{\perp}z; & z > 0. \end{cases}$$
(1)
Вдесь
$$\Lambda_0 = \frac{e^2}{4} \left(\frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1}\right);$$

3

ε — диэлектрическая постоянная жидкого гелия, е заряд электрона и E_{\perp} — прижимающее электрическое поле, нормальное границе раздела жидкость-пар. В приближении (1) потенциальный барьер V₀, препятствующий проникновению электрона в жидкость, считается бесконечно высоким, что приводит к граничному условию обращения волновой функции электрона в нуль: $f_l^{\infty}(0) = 0$ при z = 0 (жидкость занимает полупространство $z \le 0$, индекс $l \ge 1$ нумерует поверхностные состояния). Приближение (1) основано на том, что $V_0 \simeq 1$ эВ $\simeq 1,16 \cdot 10^4$ К на несколько порядков больше характерных гелиевых энергий и энергий связи поверхностных состояний. Использование же в качестве потенциала сил, притягивающих электрон к жидкому гелию, поляризационного потенциала сил изображения $V_{im} = -\Lambda_0/z$ обосновано, поскольку характерный масштаб локализации ПЭ в направлении, нормальном к границе раздела жидкость-пар, значительно превышает межатомные расстояния. В этом случае структура поверхности жидкого гелия несущественна, и сингулярность потенциала V_{im} при z = 0, не имеющая физического смысла, не должна сколь-нибудь существенно сказываться на энергетическом спектре ПЭ. Действительно, среднее расстояние электрона от поверхности гелия в основном состоянии (l = 1) оказывается $\langle z \rangle_1 > 10^{-6}$ см при $E_{\perp} = 0$, означая локализацию электрона на мезоскопическом расстоянии от поверхности жидкости. Для $E_{\perp} \neq 0$ такое расстояние несколько меньше. Однако даже при $E_{\perp} > 2000$ В/см оно составляет примерно 60 Å. Столь большое значение $\langle z \rangle_1$ обусловлено чрезвычайной близостью диэлектрической постоянной жидкого гелия к единице: $\varepsilon \approx 1,0572$ для ⁴He и $\varepsilon \approx 1,0428$ для ³He.

Аналитическое решение волнового уравнения для электрона с потенциальной энергией (1) известно только при нулевом значении прижимающего электрического поля. В случае его конечной величины энергии поверхностных состояний с l = 1 и l = 2 оценивают с использованием вариационного метода, в котором пробные волновые функции удобно выбрать в виде

$$f_1^{\text{var}}(z) = 2\gamma_1^{3/2} z \exp(-\gamma_1 z);$$
 (2a)

$$f_2^{\text{var}}(z) = -\frac{2\sqrt{3}\gamma_2^{5/2}}{(\gamma_1^2 - \gamma_1\gamma_2 + \gamma_2^2)^{1/2}} z \left(1 - \frac{\gamma_{12}z}{3}\right) \exp(-\gamma_2 z); \quad (26)$$
$$\gamma_{12} = \gamma_1 + \gamma_2.$$

Вариационными параметрами являются γ_1 и γ_2 . В пределе нулевого прижимающего поля волновые функции (2) переходят в точные решения уравнения Шредингера для $E_{\perp} = 0$, причем $\gamma_1 = \gamma_0$ и $\gamma_2 = \gamma_0 / 2$, где $\gamma_0 = m\Lambda_0/\hbar^2 \approx 1,32\cdot10^6$ см⁻¹ (для ненулевого прижимающего поля $\gamma_1 > \gamma_0$), а энергетический спектр является водородоподобным:

$$\Delta_l = -\frac{\Delta_0}{l^2}; \qquad \Delta_0 = \frac{\hbar^2 \gamma_0^2}{2m} \simeq 7,76 \text{ K},$$
 (3)

т — масса электрона.

Об эффективности модели (1) говорит тот факт, что имеется неплохое совпадение (с точностью ~10–15%) частот спектроскопических переходов $\omega_{21} = \Delta_{21} / \hbar$ и $\omega_{31} = \Delta_{31} / \hbar$ ($\Delta_{ll'} = \Delta_l - \Delta_{l'}$), вычисленных теоретически с использованием (3) и определенных экспериментально [1].

Вид потенциальной энергии $U_e(z)$ существенен при определении не только энергетического спектра, но и матричных элементов операторов рассеяния ПЭ на атомах гелия в паровой фазе и риплонах — квантованных капиллярных волнах. Особенно интересным оказывается электрон-риплонное рассеяние. Следует различать одно- и двухриплонные процессы рассеяния, интенсивность которых сильно зависит от волнового числа риплонов. Для однориплонных процессов, линейных по отклонению $\xi(\mathbf{r})$ границы раздела жидкость-пар от равновесной и определяющих частоту релаксации импульса ПЭ ($\mathbf{r} = \{x, y\}$), матричные элементы электрон-риплонного взаимодействия имеют вид [2]:

$$\langle l \left| V_{\mathbf{q}}^{(1r)} \right| l' \rangle = \left[V_{\mathbf{q}}^{(1r)} \right]_{ll'} = \left[eE_q(z) + eE_\perp - \left(\frac{\partial U_e}{\partial z} \right) \right]_{ll'}, \quad (4)$$

где $E_q(z)$ — вклад, обусловленный искажением поляризационного взаимодействия ПЭ с жидким гелием при отклонении формы поверхности жидкости от плоской. Соответствующие матричные элементы для двухриплонных процессов, квадратичных по $\xi(\mathbf{r})$ и определяющих релаксацию энергии электронной системы, в наиболее важном случае коротковолновых ($q \ge 2.10^7$ см⁻¹) риплонов записываются в виде

$$\left\langle l \left| V_{\mathbf{q}}^{(2r)} \left| l' \right\rangle = \left[V_{\mathbf{q}}^{(2r)} \right]_{ll'} = \left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U_e}{\partial z^2} \right)_{ll'}.$$
 (5)

Таким образом, (4) и (5) зависят от вида потенциальной энергии $U_e(z)$. При этом

$$-\left(\frac{\partial U_e}{\partial z}\right)_{ll'} = V_0 f_l(0) f_{l'}(0) - \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{ll'}; \qquad (6a)$$

$$\left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_e}{\partial z^2}\right)_{ll'} = \frac{V_0}{2} \left[f_l(0)f'_{l'}(0) + f'_l(0)f_{l'}(0)\right] + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right)_{ll'}.$$
(66)

Из вида (6) следует, что приближение (1), вообще говоря, оказывается недостаточным при вычислении матричных элементов электрон-риплонного рассеяния, так как эти элементы зависят от значений волновых функций электрона на поверхности жидкого гелия z = 0, а также высоты потенциального барьера V_0 . Конечность барьера означает, что волновая функция электрона «проникает» в жидкую фазу, где изменяется как

где

$$\kappa_l = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - \Delta_l) \simeq \kappa_0 = \frac{2mV_0}{\hbar^2},$$

 $f_l(z) \sim \exp(\kappa_l z); \quad z < 0,$

(7)

если $V_0 \gg |\Delta_l|$. Используя (7) и фундаментальное свойство $(\partial U_e / \partial z)_{ll} = 0$, легко показать, что выражения (6) преобразуются к

$$-\left(\frac{\partial U_e}{\partial z}\right)_{ll'} = \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{ll}^{1/2} \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{l'l'}^{1/2} - \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{ll'}; \quad (8a)$$

$$\left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2 U_e}{\partial z^2}\right)_{ll'} \approx \kappa_0 \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{ll}^{1/2} \left(\frac{\partial v}{\partial z}\right)_{l'l'}^{1/2} + \left(\frac{1}{2}\frac{\partial^2 v}{\partial z^2}\right)_{ll'}.$$
 (86)

Заметим, что представление матричных элементов в виде (8) позволяет вычислять их с помощью волновых функций (2), соответствующих приближению (1) для $U_e(z)$, в котором $v(z) \simeq v_0(z)$. Подобная схема вычис-

ления матричных элементов применена, в частности, недавно в [3-6].

Проблему вычисления матричных элементов следует признать принципиальной, поскольку такие фундаментальные характеристики ПЭ, как подвижность или время жизни возбужденных поверхностных состояний зависят от квадрата их модуля. В частности, недавние теоретические исследования времени жизни поверхностного состояния l = 2 [6] показали, что определяющий вклад в эту характеристику вносят двухриплонные процессы. Основной вклад в них вносят коротковолновые возбуждения, для которых соответствующие матричные элементы вычислялись с помощью (8б). Подчеркнем, что полученная оценка времени жизни порядка 10^{-6} - 10^{-7} с, и ее возможное уточнение при увеличении точности оценки вычисления соответствующих матричных элементов имеет важное значение при анализе возможности создания битов для квантовых вычислений на основе ПЭ. В этой связи установление значения волновых функций ПЭ на поверхности гелия, позволяющее вычислять матричные элементы электрон-риплонного взаимодействия с помощью (8), представляет не только фундаментальный, но и практический интерес.

Следует отметить, что энергии состояний при $V_0 \neq \infty$ ранее вычислялись с использованием различных модельных представлений для потенциала сил изображения как аналитически в пределе $E_{\perp} = 0$ [7], так и численно при конечном прижимающем поле [8,9]. Полученные значения собственных энергий дали прекрасное согласие теоретических значений энергетической щели $\Delta_{21} = \Delta_2 - \Delta_1$ и экспериментально измеренных частот спектроскопических переходов между энергетическими состояниями [1]. В то же время проблема волновых функций на поверхности гелия в общем случае, при $E_{\perp} \neq 0$, в этих работах не рассматривалась. Однако результаты работы [7] позволили получить следующее выражение для $E_{\perp} = 0$ [10]:

$$f_l^{(0)}(0) = \frac{(-1)^{l+1}}{l^{3/2}} f_1^{(0)}(0) .$$
(9)

Из (9) видно, что знаки волновых функций при z = 0чередуются при изменении квантового числа l. Обычно полагается, что в основном состоянии l = 1 волновая функция положительна и $f_1(0) > 0$ при $V_0 \neq \infty$. В дальнейшем в настоящей работе знаки нормировочных постоянных выбираются таким образом, чтобы условие (9) выполнялось. Из этих же соображений выбраны знаки вариационных волновых функций в (2). Разумеется, выбор знака волновых функций не сказывается на физически значимых величинах — энергиях собственных состояний или квадратах модуля матричных элементов (6) и (8).

Целью настоящей работы является вычисление собственных значений энергии и волновых функций ПЭ

Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2012, т. 38, № 3

для основного и первого возбужденных состояний (l = 1 и l = 2) путем решения волнового уравнения Шредингера с потенциальной энергией, содержащей вклады как от сил изображения, так и от прижимающего поля. Применена процедура вычислений, основанная на общих методах решения дифференциальных уравнений с использованием разложения искомых функций в степенной ряд. Это позволило детально проанализировать решение волновых уравнений, что невозможно при использовании стандартных математических пакетов для численных вычислений, и установить значения волновых функций ПЭ на поверхности жидкости (z = 0).

Постановка задачи

Решаем уравнение Шредингера с потенциальной энергией $U_e(z) = V_0 \theta(-z) + v(z) \theta(z)$ ($\theta(z)$ — ступенчатая функция), где

$$v(z) = -\frac{\Lambda_0}{z+\beta} + eE_{\perp}z, \qquad (10)$$

т.е. потенциал сил изображения — первый член в (10) — выбран в виде $V_{im} = -\Lambda_0 / (z + \beta)$, позволяющем избежать сингулярности потенциала при z = 0. Параметр «сдвижки» $\beta > 0$ выбирается из условия, чтобы теоретическая Δ_{21} , определенная с помощью (10), в пределе $E_{\perp} \rightarrow 0$ совпадала с экспериментально измеренным значением. Данное представление для V_{im} было предложено в [7]. При этом потенциальный барьер считается, как в (1), расположенным в плоскости z = 0. Подобное приближение было применено и в [11], где потенциал сил изображения вычислялся с учетом пространственной дисперсии диэлектрической постоянной гелия. Иной модельный подход к описанию потенциальной ямы для электрона над гелием, в котором потенциальный барьер «размыт» вблизи z = 0, был предложен в [12]. В работе [8] в качестве параметра эффективного «размытия» потенциального барьера выбрана ширина переходного слоя между жидкостью и газом, которая зависит от температуры. Следует, однако, подчеркнуть, что выбор потенциальной ямы в виде (10) или в виде, приведенном в [8,11], очень мало сказывается на его энергетическом спектре ввиду $|\Delta_{\min}| \ll |\Delta_1| \ll V_0$, где Δ_{\min} — энергия минимума потенциальной энергии. Поэтому в настоящей работе использовалась модель (10), которая математически оказалась наиболее удобной.

Уравнения Шредингера для электрона с использованием этой модели имеют вид:

$$\frac{d^2 f_{<}}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\Delta - V_0 \right) f_{<} = 0 \; ; \; z < 0 \; , \tag{11a}$$

$$\frac{d^2 f_{>}}{dz^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(\Delta + \frac{\Lambda_0}{z + \beta} - eE_{\perp} z \right) f_{>} = 0, \ z > 0, \ (116)$$

237

где Δ — собственное значение энергии и индексы «<» «>» относятся к волновым функциям в жидкой и газообразной фазах гелия соответственно. Уравнения (11) должны быть дополнены условиями непрерывности при z = 0

$$f_{<}(0) = f_{>}(0); \qquad f'_{<}(0) = f'_{>}(0)$$
(12)

и естественными граничными условиями

$$f_{<}(-\infty) = f_{>}(\infty) = 0$$
. (13)

Отметим, что условиям непрерывности невозможно удовлетворить, если положить в (11б) $\beta = 0$. Представляя $f_>(z)$ в виде ряда по z, можно показать, что этот ряд начинается с члена, пропорционального первой степени z. Это означает $f_>(0) = 0 \neq f_<(0)$. В то же время, если $\beta \neq 0$, соответствующий ряд есть разложение по степеням $z+\beta$, и граничным условиям (12), (13) можно удовлетворить.

При решении (11) удобно отдельно рассматривать случаи нулевого и ненулевого прижимающих полей.

Нулевое прижимающее поле

Введем обозначения

$$\frac{2m\Delta}{\hbar^2} = -c^2, \quad \frac{2mV_0}{\hbar^2} = V. \tag{14}$$

Выбор знака у первого члена в (14) обусловлен тем, что энергия E ожидается отрицательной, при этом считаем c > 0.

Система уравнений для функций $f_{<}, f_{>}$ в новых обозначениях имеет вид:

$$\begin{cases} \frac{d^2 f_{<}}{dz^2} - (c^2 + V) f_{<} = 0, \quad z < 0, \\ (z+\beta) \frac{d^2 f_{>}}{dz^2} + \left[-c^2 (z+\beta) + 2\gamma_0 \right] f_{>} = 0, \quad z > 0. \end{cases}$$
(15)

Решение первого из уравнений (15) при *z* < 0 очевидно:

$$f_{<}(z) = C_{<} \exp\left(\sqrt{V + c^2} z\right), \qquad (16)$$

где $C_{<}$ = const . Решение второго из уравнений (15) для положительных *z* будем искать в виде произведения

$$f_{>}(z) = (z+\beta) \exp\left[-c(z+\beta)\right] u(z) .$$
(17)

Подставляя (17) в (15) и вводя новую переменную $x = 2c(z+\beta)$, приводим уравнение для функции *и* к уравнению для вырожденных гипергеометрических функций [13]:

$$x\frac{d^{2}u}{dx^{2}} + (2-x)\frac{du}{dx} - \left(1 - \frac{\gamma_{0}}{c}\right)u = 0, \qquad (18)$$

двумя линейно-независимыми решениями которого являются функции Куммера [14], M(a,b,x) и U(a,b,x), причем $a=1-\gamma_0/c$, b=2. Заметим, что уравнение для $f_>(z)$ можно свести к уравнению Уиттеккера, упоминаемому в работе [7]. Однако решение такого уравнения выражается также через функции Куммера. Поэтому общее решение (14) для функции $f_>(z)$ запишем в виде

$$f_{>}(z) = (z+\beta) \exp\left[-c\left(z+\beta\right)\right] \left\{A_{1}M[a,b,2c(z+\beta)] + A_{2}U[a,b,2c(z+\beta)]\right\},$$
(19)

где A_1 и A_2 — постоянные, которые должны быть определены из граничных условий на бесконечности и условий непрерывности (12) при z = 0.

При целых отрицательных a (a = -n, n = 0, 1, 2, ...) функция M(a,b,x), в общем случае представляющая собою ряд, с точностью до постоянного множителя превращается в обобщенные полиномы Лагерра, а функция U(a,b,x) для таких *а* отличается от M(a,b,x)только постоянным множителем. Таким образом, в (19) вместо A1 и A2 появляется одна произвольная постоянная, которую обозначим C>. Уравнения (12), дополненные условием нормировки волновой функции $f(z) = f_{<}(z)\theta(-z) + f_{>}(z)\theta(z)$ в интервале $-\infty < z < \infty$, при этом превращаются в систему уравнений относительно $C_>$, $C_<$, решая которую при заданном β , можно установить значения этих постоянных. Однако наиболее интересным результатом является то, что собственные значения энергии для целых отрицательных а оказываются

$$c = \frac{\gamma_0}{1+n} \Rightarrow \Delta_n = -\frac{m\Lambda_0^2}{2\hbar^2(1+n)^2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots,$$
(20)

т.е. приходим к водородоподобному спектру (3), который получается при решении уравнения Шредингера с $\beta = 0$ и в котором все собственные значения энергии отрицательны и «сгущаются» к нулю. Важно подчеркнуть, что энергии (20) не зависят от параметра β , значения которого вычисляются независимо и, следовательно, не могут быть использованы в качестве подгоночного параметра для приведения Δ_{21} в точное соответствие с экспериментальными значениями (как мы отмечали во Введении, «водородоподобное» решение (3), (20) приводит к Δ_{21} и Δ_{31} , отличающимся от экспериментально измеренных значений). Это означает, что использование целых отрицательных *а* для конечного β , в отличие от предела $\beta = 0$, необосновано.

Поэтому будем предполагать *а* нецелым. Функция $f_{>}(z)$ в этом случае по-прежнему задается (19). Однако при $x \to \infty$ функция M(a,b,x) для нецелого *а* растет экспоненциально, поэтому постоянную A_1 в (19) следует положить равной нулю. Функция U(a,b,x)при $x \to \infty$ убывает степенным образом, т.е. удовлет-

Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2012, т. 38, № 3

воряет граничному условию (13) на бесконечности. При x = 0 эта функция имеет логарифмическую особенность, однако, как видно из (19), эта особенность «сдвигается» в точку $z = -\beta$, в результате при $z \ge 0$ функция ограничена. Таким образом, в случае нецелого *а* в решении (19) оставляем только U(a,b,x) и одну произвольную постоянную $C_{>} = A_2$, т.е.

$$f_{>}(z) = C_{>}(z+\beta) \exp[-c(z+\beta)] U[a,b,2c(z+\beta)].$$
 (21)

Далее используем тот факт, что отклонение собственных значений энергии от (3) невелико и, как в [7], будем считать, что *а* мало отличается от целых значений:

$$a = 1 - \frac{\gamma_0}{c} = -n + \delta, \tag{22}$$

где δ(β) — малая добавка. Таким образом, параметр *c* (приведенная энергия) в этом случае приводит к следующему энергетическому спектру:

$$c = \frac{\gamma_0}{1+n-\delta} \Longrightarrow \Delta_n = -\frac{m\Lambda_0^2}{2\hbar^2(1+n-\delta)^2}, \qquad (23)$$

где по-прежнему n = 0, 1, 2.... Удовлетворяя условиям (12), получаем систему уравнений (дополненную условием нормировки волновой функции), одно из которых, как и в случае целых отрицательных a, дает связь между постоянными $C_{<}$ и $C_{>}$, а еще одно превращается в уравнение относительно $\delta(\beta)$, причем β теперь является подгоночным параметром. От номера уровня n величина δ практически не зависит, а зависимость δ от β близка к линейной. Решая эту систему, получаем волновую функцию ПЭ во всем интервале $-\infty < z < \infty$.

Поскольку вычисление нормы волновой функции (19) (при $A_1 = 0$) с использованием представления функции Куммера U(a,b,z) в виде ряда привело к вычислительным трудностям, то при *z* больше некоторого Z_0 вместо ряда использовалось асимптотическое представление

$$U(a,b,z) = z^{-a} \left\{ \sum_{n=0}^{R-1} \frac{(a)_n (1+a-b)_n}{n!} (-z)^{-n} + O\left(|z|^{-R}\right) \right\}.$$

В качестве «точки сшивки» Z_0 бралось максимальное значение z, при котором приближенное значение функции Куммера, вычисленное с помощью ряда, совпадало с точным. Для основного состояния $Z_0 \sim 500\beta$, а для первого возбужденного $Z_0 \sim 1500\beta$. Заметим, что основной вклад в нормировочный интеграл давал именно отрезок $[0, Z_0]$, влияние асимптотического «хвоста» оказывалось пренебрежимо малым.

Наилучшее согласие с экспериментальными данными [1] для ⁴Не ($\Delta_{21} = 6,04$ К, $\Delta_{31} = 7,13$ К) достигается при $\beta \approx 1,07$ Å ($V_0 = 1$ эВ). В случае ³Не, когда $\Delta_{21} = 3,35$ К, $\Delta_{31} = 3,99$ К ($V_0 \approx 0,9$ эВ) [15], соответствующее значение $\beta \approx 1,364$ Å. Значение β подбиралось таким образом, чтобы получить максимально близкую к экспериментальной энергетическую щель между основным (l = n + 1 = 1) и первым возбужденным (l = n + 1 = 2) состояниями. При этом теоретическое значение $\Delta_{31} \approx 7,134$ К оказывается немного больше экспериментального для ⁴Не и чуть меньше для ³Не: $\Delta_{31} \approx 3,96$ К. Поскольку в литературе сообщается о разных величинах V_0 , определенных экспериментально [16,17], интересно проверить, как изменяется «оптимальное» значение β в зависимости от V_0 . Соответствующие значения приведены в табл. 1.

Таблица 1. Значения параметра β для некоторых величин потенциала V_0

V ₀ , эВ	0,9	0,97	1,0	1,1	1,2	1,3
⁴ He, β , Å		1,0968	1,0696	0,98635	0,9138	0,84975
3 He, β , Å	1,364		1,264			

Учет прижимающего поля

Будем считать, что параметр β при $E_{\perp} \neq 0$ не изменяется по сравнению со случаем нулевого прижимающего поля для того же V_0 , и рассмотрим уравнения (11). Введем обозначение $\gamma_E^3 = 2meE_{\perp}/\hbar^2$. В отличие от задачи без прижимающего поля, для конечного прижимающего поля собственные значения энергии электрона Δ могут принимать положительные и отрицательные значения, поэтому введем параметр $K = = 2m\Delta/\hbar^2$, который может быть как положительным, так и отрицательным. В результате решение уравнения (11а) по-прежнему задается выражением (16), а уравнение (11б) принимает вид

$$\frac{d^2 f_{>}}{dz^2} + \left(K + \frac{2\gamma_0}{z+\beta} - \gamma_E^3 z\right) f_{>} = 0.$$
(24)

При $z \to \infty$ для любого конечного прижимающего поля в (24) можно пренебречь членом, пропорциональным $1/(z+\beta)$ и соответствующим потенциалу сил изображения, и уравнение превращается в уравнение для функций Эйри. В этом случае для энергетического спектра и волновых функций имеем:

$$\Delta_l = \zeta_l \frac{eE_\perp}{\gamma_E}; \quad f_{>}^{(l)}(z) \simeq \frac{\gamma_E^{1/2}}{|\operatorname{Ai}'(-\zeta_l)|} \operatorname{Ai}(\gamma_E z - \zeta_l), \quad (25)$$

где Ai(x) и Ai'(x) — функция Эйри и ее производная, ζ_l — нули функции Эйри, чьи значения возрастают с увеличением $l: \zeta_l \simeq 2,338; \zeta_2 \simeq 4,088; \zeta_l \simeq (3\pi l/2)^{2/3}$ при $l \gg 1$. Асимптотическое поведение волновой функции (25) при $\gamma_E z - \xi_l = \tilde{z} \to \infty$ имеет вид:

$$f_{>}^{(l)}(\tilde{z}) \sim \operatorname{Ai}(\tilde{z}) \sim \frac{1}{2} \pi^{-1/2} \tilde{z}^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3} \tilde{z}^{3/2}\right).$$
 (26)

Такое асимптотическое поведение сильно отличается от поведения соответствующей волновой функции в пределе $E_{\perp} = 0$, когда, согласно (21), $f_{>}^{(l)}(z) \sim \exp(-cz)$ при $z \to \infty$. Именно это различие приводит к тому, что процедуры решения волнового уравнения для ПЭ оказываются существенно разными для нулевого и конечного прижимающих полей и аналитическое решение волнового уравнения при $E_{\perp} \neq 0$ оказывается невозможным.

Решение уравнения (24), соответствующее асимптотическому поведению (26), при $z > Z_0$ (смысл Z_0 теперь иной, чем в пределе нулевого прижимающего поля, рассмотренном в предыдущем разделе) ищем в виде

$$f_{>}(z) = C_{>}(\gamma_E z - S)^{-1/4} \exp\left[-\frac{2}{3}(\gamma_E z - S)^{3/2}\right] \times$$
$$\times w\left(\sqrt{\gamma_E z - S}\right); \qquad S = \frac{K}{\gamma_E^2}, \qquad (27)$$

где $w(x) \rightarrow \text{const}$ при $x \rightarrow \infty$;

$$w(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{q_n}{x^n} \,. \tag{28}$$

Значение Z_0 зависит от E_{\perp} : чем больше E_{\perp} , тем при меньшем z справедливо выражение (27). Коэффициенты q_n , представляющие собой полиномы относительно параметра $B = \beta \gamma_E + S$, находятся из рекуррентных соотношений, возникающих из условия приравнивания нулю коэффициентов при различных степенях аргумента $\sqrt{\gamma_E z - S}$ в левой части (24) при подстановке туда (27):

$$q_{1} = -\frac{2\gamma_{0}}{\gamma_{E}}q_{0}; \quad q_{2} = -\frac{\gamma_{0}}{\gamma_{E}}q_{1};$$

$$q_{3} = -\frac{1}{12}\left(\frac{8\gamma_{0}}{\gamma_{E}}q_{2} + 4Bq_{1} + \frac{5}{4}q_{0}\right);$$

$$q_{4} = -\frac{1}{16}\left[\frac{8\gamma_{0}}{\gamma_{E}}q_{3} + 8Bq_{2} + \left(4 + \frac{5}{4}\right)q_{1}\right];$$

$$q_{n} = -\frac{1}{4n}\left\{\frac{8\gamma_{0}}{\gamma_{E}}q_{n-1} + 4B(n-2)q_{n-2} + \left[(n-3)(n+5) + \frac{5}{4}\right]q_{n-3} + \left[Bn(n+3) + \frac{5}{4}B\right]q_{n-5}\right\}$$

при $n \ge 5$.

Параметр q_0 остается неопределенным, и можно положить $q_0 = 1$, поскольку, как легко видеть, его можно включить в постоянную $C_>$ в (27). В интервале $0 < z < Z_0$, когда по мере уменьшения z все бо́льшую роль в (24) играет второй член в скобках, пропорциональный $(z+\beta)^{-1}$, решение уравнения ищем в виде

$$f_{>}(z) \sim (z+\beta) \exp(-bz)g(z+\beta) , \qquad (29)$$

где параметр *b* в дальнейшем подлежит определению. Подставляя (29) в (24), получаем уравнение для функции $g(z_0) = g(z+\beta)$:

$$z_0 \frac{d^2 g}{dz_0^2} + (2 - 2bz_0) \frac{dg}{dz_0} + \left[2\gamma_0 - 2b + (C + b^2 + \gamma_E^3\beta)z_0 - \gamma_E^3 z_0^3 \right] g = 0,$$

которое при $\gamma_E = 0$ и $C = -b^2$ сводится к уравнению для вырожденных гипергеометрических функций (18).

Общее решение запишем как

+

$$g(z+\beta) = C_{>}^{(1)}g_1(z+\beta) + C_{>}^{(2)}g_2(z+\beta), \qquad (30)$$

где $C^{(1)}_{>}$ и $C^{(2)}_{>}$ — постоянные, а два линейно-независимых решения имеют вид

$$g_{1}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} c_{n} z^{n}, \quad g_{2}(z) = a_{1} g_{1}(z) \ln(z) + \left(-1 + \sum_{n=1}^{\infty} d_{n} z^{n}\right).$$
(31)

Коэффициенты a_1 , c_n , d_n вычисляются по рекуррентным формулам:

$$\begin{aligned} c_0 &= 1, \quad c_1 = b - \gamma_0, \\ c_2 &= -\left[-\left(4b + 2\gamma_0\right)c_1 + \left(K + \gamma_E^3\beta + b^2\right)c_0\right]/6, \\ c_n &= -\frac{1}{n(n+1)} \times \\ \times \left\{ \left[2\gamma_0 - 2bn\right]c_{n-1} + \left(K + \gamma_E^3\beta + b^2\right)c_{n-2} - \gamma_E^3c_{n-3} \right\}, \ n \geq 3. \\ a_1 &= 2\gamma_0; \quad d_0 &= -1; \quad d_1 = 1; \\ d_2 &= -\left[3a_1c_1 + \left(K + \gamma_E^3\beta + b^2\right)d_0 + 2\gamma_0d_1 - 2b(a_1c_0 + d_1)\right]/2, \\ d_n &= -\left\{(2n-1)c_{n-1}a_1 - 2ba_1c_{n-2} + \left(2\gamma_0 - 2b(n-1)\right)d_{n-1} + \right. \\ &+ \left.\left.\left(K + \gamma_E^3\beta + b^2\right)d_{n-2} - \gamma_E^3d_{n-3}\right)\right\}/\left(n(n-1)\right); \quad n \geq 3. \end{aligned}$$

Таким образом, решение волнового уравнения для функции $f_{>}(z)$ в случае $E_{\perp} \neq 0$ можно записать в виде

$$f_{>}(z) = \begin{cases} \exp(-bz) \Big[C_{>}^{(1)} g_{1}(z+\beta) + C_{>}^{(2)} g_{2}(z+\beta) \Big]; & 0 < z < Z_{0} \\ C_{>} (\gamma_{E}z-S)^{-1/4} \exp\left[-\frac{2}{3} (\gamma_{E}z-S)^{3/2} \right] w(\sqrt{\gamma_{E}z-S}), & z > Z_{0} . \end{cases}$$
(32)

При отрицательных z имеем $f_{<}(z) = C_{<} \exp(\sqrt{V - Kz})$.

Параметры $C_>$, $C_<$, $C_>^{(1)}$, $C_>^{(2)}$ находились из условий непрерывности волновой функции в точках z = 0 и $z = Z_0$. При этом оказалось, что значение Kявляется корнем уравнения, возникающего из условия совместности уравнений для определения $C_>^{(1)}$ и $C_>^{(2)}$. Процедура численных расчетов очень громоздка и трудоемка, основной причиной чего является зависимость от K коэффициентов в рекуррентных соотношениях, определяющих волновую функциию $f_>(z)$ в (32). Именно этим обстоятельством объясняется тот факт, что невозможно выразить решение уравнения Шредингера при $E_\perp \neq 0$, в отличие от предела нулевого прижимающего поля, через какую-либо специальную функцию.

Показатель экспоненты *b* и положение точки сшивки Z_0 являются подгоночными параметрами. При малых полях будем брать Z_0 близким к значению Z_0 в случае нулевого прижимающего поля (~500 β для основного энергетического состояния и ~1500 β для первого возбужденного). С ростом E_{\perp} волновая функция «прижимается» к началу координат и Z_0 уменьшается. В отличие от предела $E_{\perp} = 0$, четкого критерия для подбора Z_0 нет. Однако, как показывают численные расчеты, значение Z_0 влияет на решение незначительно. При подборке значения параметра *b* учитывалось, что малые *b* не «подавляют» рост функций g_1 и g_2 в (32) с возрастанием *z*, а также приводят к лишенному физического смысла дополнительному максимуму волновой функции основного состояния на интервале $0 < z < Z_0$. При проведении расчетов оптимальными оказались значения $b \approx 12\gamma_E$ для основного состояния и $b \approx 27\gamma_E$ для первого возбужденного, для которых корректное поведение волновых функций обеспечено. При этом для достижения необходимой точности для l = 1 в рядах для $g_1(z)$ и $g_2(z)$ оказалось достаточно ограничиться 50 слагаемыми, а для l = 2 — ста пятьюдесятью.

Результаты и обсуждение

В настоящем разделе приведены результаты численных расчетов. В качестве подложки выбран ⁴He, вычисления выполнены для $V_0 = 1$ эВ и $\beta = 1,07$ Å. На рис. 1 приведены волновые функции $f_1(z)$ и $f_2(z)$ для нулевого прижимающего поля. На рисунке также помещены для сравнения вариационные волновые функции (2). Видно хорошее согласие точного решения и приближенных волновых функций, параметры которых



Рис. 1. Волновые функции основного (*a*) и первого возбужденного состояний поверхностных электронов (*б*) в нулевом прижимающем поле. Сплошная линия — результат точного решения, пунктирная — вариационное решение (2).

Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2012, т. 38, № 3



Рис. 2. Волновые функции основного (*a*) и первого возбужденного состояний (б) поверхностных электронов при $E_{\perp} = 2000$ В/см. Индексы при линиях соответствуют: «*1*» точное решение; «*2*» — вариационные волновые функции (2); «*3*» — функции Эйри (25); «*4*» — волновые функции при $E_{\perp} = 0$.

установлены с помощью вариационного метода. Для иллюстрации влияния прижимающего поля на рис. 2 показаны волновые функции для $E_{\perp} = 2000$ В/см. На этом же рисунке помещены вариационные функции (2), функции Эйри (25), а также волновые функции в нулевом прижимающем поле (см. рис. 1). Согласие точной и вариационной волновых функций является хорошим и для основного, и для возбужденного состояний. Отметим практическое совпадение положений экстремумов и нулей точного и вариационного решений.

На рис. 3 приведены собственные значения энергии ПЭ Δ_1 и Δ_2 для основного и первого возбужденного состояний в зависимости от прижимающего электрического поля. Для сравнения на рисунке приведены эти же энергии, вычисленные с помощью вариационных волновых функций (2) (выражения для $\Delta_1^{(var)}$ и $\Delta_2^{(var)}$ приведены в [6]). Как и для волновых функций, имеется хорошее согласие между энергиями, вычисленными при решении волнового уравнения и полученными вариационным методом. На рис. 3,6 приведена энер-



гетическая щель Δ_{21} , рассчитанная точно, и довольно мало от нее отличающаяся $\Delta_{21}^{(var)}$, вычисленная с помощью вариационных волновых функций. Отметим, что Δ_{21} практически совпадает с результатами вычисления этой величины в [8,9].

Наконец, на рис. 4 приведены $f_1(0)$ и $f_2(0)$. На рисунке также приведены приближенные значения этих величин, полученные косвенным путем с использованием волновых функций (2). Имеется две возможности получения таких приближенных значений. Первая основана на том, что, хотя в приближении (2) волновые функции равны нулю при z = 0, с помощью (2) можно удовлетворить условию совпадения производных волновых функций слева и справа от нуля (см. (16) для волновой функции при z < 0). В результате получаются следующие приближенные выражения для значений функций в точке z = 0:

$$\tilde{f}_1(0) = \frac{2\gamma_1^{3/2}}{\kappa_0}; \ \tilde{f}_2(0) = -\frac{2\sqrt{3}\gamma_2^{5/2}}{\kappa_0 \left(\gamma_1^2 - \gamma_1\gamma_2 + \gamma_2^2\right)^{1/2}}. \ (33)$$



Рис. 3. Собственные энергии основного («*1*») и первого возбужденного («*2*») состояний (*a*), а также энергетическая щель Δ_{21} (*б*), рассчитанные при точном решении уравнения Шредингера (сплошные линии) и с помощью вариационного метода (пунктир).

Рис. 4. Абсолютные значения волновых функций основного (*a*) и возбужденного (δ) состояний поверхностных электронов при z = 0. «*1*» — точное решение; «*2*» и «*3*» — значения, вычисленные по формулам (34) и (33) соответственно.

Другая возможность оценить значение волновой функции ПЭ на поверхности гелия следует из отмеченного выше свойства матричных элементов электронриплонного рассеяния $(\partial U_e / \partial z)_{ll} = 0$, из которого легко получить выражение

$$\left| f_l^{(0)}(0) \right| \simeq \frac{\sqrt{2m}}{\hbar \kappa_0} \left[\left(\frac{\partial v}{\partial z} \right)_{ll} \right]^{1/2}$$

с помощью которого из (6) получаются соотношения (8). Если для вычисления матричных элементов $(\partial v / \partial z)_{ll}$ использовать приближение (1) и волновые функции (2), то приходим к следующим приближенным выражениям для $\tilde{f}_1^{(0)}$ и $\tilde{f}_2^{(0)}$ [2]:

$$\tilde{f}_{1}^{(0)} \simeq \frac{\sqrt{4\gamma_{0}\gamma_{1}^{2} + \gamma_{E}^{3}}}{\kappa_{0}};$$

$$\tilde{r}_{2}^{(0)}(0) \simeq -\frac{1}{\kappa_{0}} \sqrt{\frac{2}{3} \left(\frac{\gamma_{1}^{2} - 4\gamma_{1}\gamma_{2} + 13\gamma_{2}^{2}}{\gamma_{1}^{2} - \gamma_{1}\gamma_{2} + \gamma_{2}^{2}}\right) \gamma_{0}\gamma_{2}^{2} + \gamma_{E}^{3}}, (34)$$

где γ_E имеет тот же смысл, что в (24). Интересно отметить, что $\tilde{f}_1(0) = \tilde{f}_1^{(0)}(0)$ и $\tilde{f}_2(0) = \tilde{f}_2^{(0)}(0)$ при $E_{\perp} = 0$.

Сравнение численно рассчитанных нами $f_1(0)$ с приближенными значениями, задаваемыми (33) и (34), приведено на рис. 4,*a*. Видно, что $f_1(0)$ и $\tilde{f}_1^{(0)}(0)$ очень близки, причем при $E_{\perp} = 0$ имеем $f_1(0) \approx 62, 3 \text{ см}^{-1/2}$, тогда как $\tilde{f}_1^{(0)}(0) = \tilde{f}_1(0) \approx 58, 7 \text{ см}^{-1/2}$. При увеличении прижимающего поля согласие между $f_1(0)$ и $\tilde{f}_1^{(0)}(0)$ сохраняется. Практически это означает, что первое из выражений (34) может быть использовано для оценки значения волновой функции основного состояния при z = 0 во всем интервале 0 В/см $< E_{\perp} < 3000$ В/см, представляющем интерес.

Аналогичная ситуация наблюдается для первого возбужденного состояния l = 2 (рис. 4, δ). На рисунке приведены абсолютные значения волновых функций. Согласие между точным $f_2(0)$ и $\tilde{f}_2^{(0)}(0)$, как и в случае l = 1, является достаточно хорошим. Для $E_{\perp} = 0$ имеем $f_2(0) \approx -21.6$ см^{-1/2}, тогда как $\tilde{f}_2^{(0)}(0) = \tilde{f}_2(0) \approx$ ≈ -20.8 см^{-1/2}. Заметим, что при этом отношение $f_1(0)/f_2(0)$ практически совпадает с $\tilde{f}_1^{(0)}/\tilde{f}_2^{(0)} = -1/2^{3/2}$ в согласии с (9). Близость $f_2(0)$ и $\tilde{f}_2^{(0)}(0)$ при ненулевом прижимающем поле в интервале 0 В/см $< E_{\perp} <$ < 3000 В/см, хорошо видная на рис. 4, δ , означает возможность использования для оценки $f_2(0)$ приближенного значения $\tilde{f}_2^{(0)}(0)$, задаваемого вторым из выражений (34).

Как мы уже отмечали, результаты, приведенные на рис. 1–4, получены для ПЭ над ⁴Не. На рис. 5 проведено сравнение $f_1(0)$ и $f_2(0)$ в случае электронов над жидкими ⁴Не (сплошные линии) и ³Не (пунктирные линии) для нескольких величин потенциального барьера V_0 . Кривые для $f_1(0)$ в случае ⁴Не приведены для



Рис. 5. Значения $f_1(0)$ и $f_2(0)$ для поверхностных электронов над ⁴Не и ³Не для нескольких значений V_0 .

 $V_0 = 1,0$ эВ; 1,1 и 1,3 эВ (сверху вниз), в случае ³Не — для $V_0 = 0,9$ эВ (верхняя кривая) и 1,0 зВ (нижняя кривая). Значения $f_1(0)$ при $E_{\perp} = 0$ для ³Не составляют 41,5 и 39,5 см^{-1/2} соответственно для приведенных значений V_0 . Для $f_2(0)$ ситуация обратная — кривые с меньшим V_0 расположены ниже. При этом зависимость от V_0 очень мала. Значения $f_2(0)$ для нулевого прижимающего поля составляют 14,5 и 13,8 см^{-1/2} для $V_0 = 0,9$ эВ и 1,0 зВ. Отметим, что для возбужденного состояния соответствующие кривые фактически сливаются.

Заключение

В настоящей работе вычислены собственные значения энергии и волновые функции основного и первого возбужденного связанных состояний поверхностных электронов над жидким гелием. Для решения проблемы волновые дифференциальные уравнения, описывающие движение электрона, решены методом разложения волновой функции в ряд в случае для потенциала, включающего модельное описание сил изображения и зависящего от прижимающего электрического поля. Установлено существенное различие решения для нулевого и конечного прижимающих полей, обусловленное разным асимптотическим поведением волновой функции при $z \rightarrow \infty$, что приводит к совершенно разным процедурам решения волнового уравнения в этих пределах. Найденные значения энергий состояний и величины энергетической щели находятся в хорошем согласии со значениями, полученными с использованием вариационного метода.

Вычислены значения волновой функции электрона на поверхности гелия (при z = 0). Точные значения для $f_l(0)$ сравнены с приближенными значениями, полученными косвенным путем с использованием выражений для волновых функций, справедливых в приближении бесконечного потенциального барьера, препятствующего проникновению электрона в жидкость. Сравнение позволило установить, что приближения (2), параметры которых определяются с помощью вариационного метода, приводят к выражениям (34) для волновых функций на границе раздела жидкость-пар, которые с хорошей точностью (~5%) близки к точным значениям $f_l(0)$ во всем исследованном интервале прижимающих полей. Учитывая этот факт и принимая во внимание эквивалентность (6) и (8), можно сделать вывод, что применение приближения (2) для вычисления по формулам (8) матричных элементов как одно-, так и двухриплонных процессов рассеяния является обоснованным. В частности, тем самым подтверждается достоверность оценок времени жизни возбужденных поверхностных состояний электронов над жидким гелием, сделанных с использованием этого приближения [3-6].

Работа частично поддержана УНТЦ грантом 5211.

Выражаем благодарность Е.Я. Хруслову, Ю.П. Монарха, В.Е. Сивоконю за обсуждение результатов работы.

- 1. C.C. Grimes, T.R. Brown, M.L. Burns, and C.L. Zipfel, *Phys. Rev.* **B13**, 140 (1976).
- 2. Y. Monarkha and K. Kono, *Two-Dimensional Coulomb Liquids and Solids*, Springer, Berlin (2004).
- Yu.P. Monarkha and S.S. Sokolov, *Fiz. Nizk. Temp.* 32, 1278 (2006) [Low Temp. Phys. 32, 970 (2006)].
- D. Konstantinov, Yu. Monarkha, and K. Kono, *Fiz. Nizk. Temp.* 34, 470 (2008) [*Low Temp. Phys.* 34, 377 (2008)].
- S.S. Sokolov, J.M. Villas-Bôas, Yu.P. Monarkha, and N. Studart, *Fiz. Nizk. Temp.* **34**, 480 (2008) [*Low Temp. Phys.* **34**, 385 (2008)].
- Yu.P. Monarkha, S.S. Sokolov, A.V. Smorodin, and N. Studart, *Fiz. Nizk. Temp.* **36**, 711 (2010) [*Low Temp. Phys.* **36**, 565 (2010)].
- O. Hipolito, J.R.D. de Felício, and G.A. Farias, *Solid State Commun.* 28, 365 (1978).
- M.H. Degani, G.A. Farias, and F.M. Peeters, *Phys. Rev.* B72, 1255408 (2005).
- 9. I. Karakurt, J. Low Temp. Phys. 154, 77 (2009).

- Ю.П. Монарха, ФНТ 4, 1093 (1978) [Sov. J. Low Temp. Phys. 4, 515 (1978)].
- А.М. Габович, Л.Г. Ильченко, Э.А. Пашицкий, ЖЭТФ 79, 665 (1980).
- H.H. Huang, Y.M. Shin, and C.-W. Woo, J. Low Temp. Phys. 14, 413 (1974).
- Э. Камке, Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям, Наука, Москва (1971).
- Справочник по специальным функциям, М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), Наука, Москва (1979).
- А.П. Володин, В.С. Эдельман, Письма ЖЭТФ 30, 668 (1979).
- В.Б. Шикин, Ю.П. Монарха, ФНТ 1, 957 (1975) [Sov. J. Low Temp. Phys. 1, 459 (1975)].
- 17. W.T. Sommer, Phys. Rev. Lett. 12, 271 (1964).

Wave functions and energies of bound electron states over liquid helium

T.I. Zueva and S.S. Sokolov

The self-energies and wave functions of the first two surface electron states over liquid helium are found when solving the differential wave equations by the expansion method in holding field range of 0 V/cm $< E_{\perp} < 3000$ V/cm. Applying the model potential for image force potential and taking into account the finiteness of potential barrier for electron penetration into liquid, the electron wave functions are specified at the vapor–liquid boundary. Comparison between the results obtained and those estimated approximately within the variational ansatz demonstrates the reliability of variational approach to calculate the matrix elements of electron-ripplon scattering.

PACS: **73.20.-r** Electron states at surfaces and interfaces.

Keywords: liquid helium, surface electron states, interphase boundary.