

## Поверхностные электроны над жидким гелием в пористых средах

Т.И. Зуева, Ю.З. Ковдря, 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 15 июня 2006 г., после переработки 17 июля 2006 г.

Теоретически исследован энергетический спектр электронов, локализованных вблизи поверхности жидкого гелия в пористых средах. Рассмотрен случай, когда электрон подведен снаружи к тонкой нити, покрытой гелиевой пленкой. Изучена локализация частицы в сферической полости, стенки которой покрыты гелием. С использованием вариационного метода найдены значения энергии основного состояния и соответствующие волновые функции для электрона над цилиндрической нитью. В случае локализации электрона в сферической полости собственные значения энергии и волновые функции рассчитаны при численном решении волнового уравнения. Полученные результаты, дополняющие ранее полученные сведения об энергетическом спектре электрона, расположенного внутри нанотрубки, расширяют представления о свойствах электронов, находящихся в пористых средах, которые частично заполнены гелием.

Теоретично досліджено енергетичний спектр електронів, які локалізовані поблизу поверхні рідкого гелію у пористих середовищах. Розглянуто випадок, коли електрон підведено зовні до тонкої нитки, покритої гелієвою плівкою. Вивчено локалізацію частинки у сферичній порожнині, стінки якої покриті гелієм. З використанням варіаційного методу знайдено значення енергії основного стану та відповідні хвильові функції для електрона над циліндричною ниткою. У випадку локалізації електрона в сферичній порожнині власні значення енергії та хвильові функції розраховано при чисельному рішенні хвильового рівняння. Результати, що одержано, доповнюють раніше отримані відомості щодо енергетичного спектра електрона, розташованого усередині нанотрубки, розширюють уявлення про властивості електронів, що знаходяться у пористих середовищах, які частково заповнені гелієм.

PACS: 67.40.Jg, 73.20.Fz

**Ключевые слова:** пористые среды, нанотрубки, волновые функции.

### 1. Введение

Двумерная электронная система над жидким гелием является предельно чистой низкоразмерной зарядовой системой, изучение которой имеет как чисто научное, так и прикладное значение [1]. В настоящее время обсуждается возможность использования электронов, локализованных над поверхностью сверхтекучего гелия, в качестве битов для квантовых компьютеров [2].

При исследовании двумерных электронных систем над жидким гелием был получен ряд важных результатов, среди которых следует упомянуть экс-

периментальное обнаружение и теоретическое исследование взаимодействия электронов с тепловыми возбуждениями поверхности сверхтекучего гелия, обнаружение двумерного электронного кристалла и изучение его свойств, а также ряд других результатов. Использование поверхностных электронов позволило реализовать одномерные и квазиодномерные зарядовые системы над жидким гелием [3,4], которые в настоящее время широко изучаются как экспериментально [5], так и теоретически [6].

В последнее время имеется значительный интерес к возможности создания низкоразмерных зарядовых систем в наноструктурах. В недавней работе ав-

торов [7] было показано, что электроны могут локализоваться в наноканалах, создаваемых в средах с малой электрической поляризуемостью. Был определен потенциал взаимодействия электрона с окружающим веществом и исследована зависимость энергии электрона от радиуса канала.

В настоящей работе изучается энергетический спектр поверхностных электронов в пористых средах, в которых сконденсирована пленка жидкого гелия (полученные результаты могут быть также использованы в случае покрытия из водорода или неона). Среди пористых материалов наиболее часто встречаются такие, в которых полости, близкие к сферическим, соединены между собой короткими каналами меньшего диаметра, и вещества, составленные из хаотически расположенных тонких диэлектрических нитей малого диаметра, причем расстояние между нитями много больше их диаметра (аэрогель). Мы исследуем энергетический спектр электронов вблизи диэлектрического стержня, покрытого жидким гелием, а также в сферической полости. Полученные данные, вместе с результатами проведенного ранее расчета энергетического спектра электрона в капиллярах малого диаметра [7], позволяют составить представление о поведении электронов в пористых средах, частично заполненных гелием. Проведенные расчеты могут быть использованы при рассмотрении покрытий из твердых водорода и неона.

## 2. Электрон вблизи тонкого стержня

### 2.1. Потенциал взаимодействия: точное выражение и приближения

Рассмотрим электрон, подведенный к бесконечно длинному цилиндрическому стержню радиуса  $R_2$ , покрытому гелиевой пленкой толщиной  $d = R_1 - R_2$  (см. рис. 1). Потенциал взаимодействия электрона со стержнем, по аналогии с результатами [7], можно записать в виде

$$U(r) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} F(r, R_1) - \frac{\Lambda_1}{\pi} F(r, R_2), \quad (1)$$

где

$$F(r, R) = \int_{-\infty}^{\infty} dz' \int_0^{2\pi} d\phi' \int_0^R \frac{r' dr'}{[|r - r'|^2 + (z - z')^2]^2}$$

и

$$\Lambda_0 = \frac{\pi \kappa_2 n_2 e^2}{2}, \quad \Lambda_1 = \frac{\pi (\kappa_1 n_1 - \kappa_2 n_2) e^2}{2}$$

( $\kappa_1$  и  $\kappa_2$  — атомная поляризуемость сред 1 (цилиндрическая нить) и 2 (жидкий гелий) с объемной концентрацией атомов  $n_1$  и  $n_2$ ).

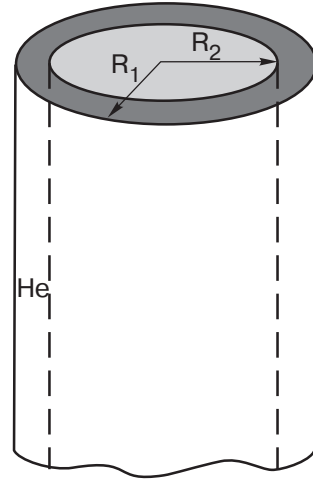


Рис. 1. Схематический вид цилиндрической нити, покрытой слоем гелия, к которой снаружи подводится электрон.

Функция  $F(r, R)$  имеет структуру, сходную с той, что имеется для зарядов, локализованных внутри диэлектрического цилиндрического канала [7], однако пределы интегрирования по  $r$  теперь иные. После интегрирования по  $z$  и  $\phi$  функция  $F(r, R)$  принимает вид

$$F(r, R) = \frac{2\pi}{R} f\left(\frac{r}{R}\right),$$

$$f(x) = \int_0^1 \frac{E[2\sqrt{xy}/(x+y)]}{(x+y)(x-y)^2} y dy,$$

где  $E(x)$  — полный эллиптический интеграл. Если  $x \rightarrow 1$ , то  $f(x) \simeq (x^2 - 1)^{-1}$ , а в пределе  $x \gg 1$  имеем  $f(x) \simeq \pi/(4x^3)$ . Функция  $f(x)$  может быть аппроксимирована как  $f(x) \simeq f^*(x)$ , где

$$f^*(x) \simeq \frac{1}{x} \left[ \frac{1}{x^2 - 1} + \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\sqrt{x^2 - 1}}{x} \right) \right]. \quad (2)$$

О точности данной аппроксимации можно судить по рис. 2, где показана разность  $f(x) - f^*(x)$ . Заметим, что  $f^*(x) \simeq 3/(4x^3)$  при  $x \rightarrow \infty$ . При  $x \rightarrow 1$  обе функции отличаются не более чем на 2–3%.

Используя аппроксимацию (2), потенциал  $U(r)$  можно представить как

$$U(r) \simeq -\frac{2\Lambda_0 R_1^2}{r} \left[ \frac{1}{r^2 - R_1^2} + \frac{1}{4R_1^2} \ln \left( 1 - \frac{R_1^2}{r^2} \right) \right] -$$

$$-\frac{2\Lambda_1 R_2^2}{r} \left[ \frac{1}{r^2 - R_2^2} + \frac{1}{4R_2^2} \ln \left( 1 - \frac{R_2^2}{r^2} \right) \right]. \quad (3)$$

Легко видеть, что при  $r \gg R_1 > R_2$  имеется асимптотика

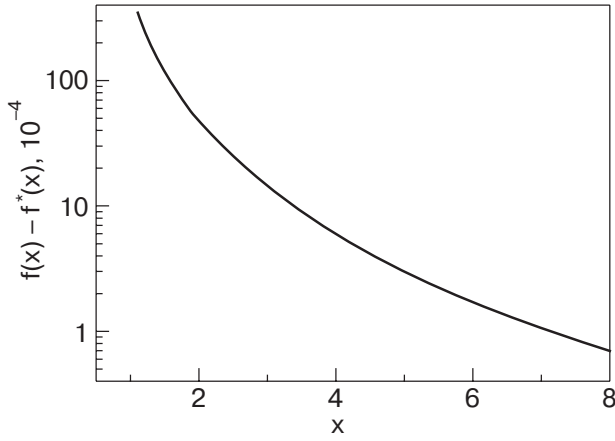


Рис. 2. Функция  $f(x) - f^*(x)$ , характеризующая отклонение  $f(x)$  от аппроксимирующего выражения  $f^*(x)$ .

$$U(r) \simeq -\frac{2(\Lambda_0 R_1^2 + \Lambda_1 R_2^2)}{r^3},$$

а если  $r - R_1 \ll R_1$ , то

$$U(r) \simeq -\frac{\Lambda_0}{\xi} - \frac{\Lambda_1}{\xi + d}, \quad \xi = r - R_1,$$

т.е. мы получаем выражение для потенциала электрона над плоской поверхностью диэлектрика, покрытого пленкой гелия [1].

## 2.2. Энергия основного состояния

Для отыскания уровней энергии электрона, локализованного вблизи стержня, покрытого слоем гелия, нужно решить уравнение Шредингера:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{\partial^2 \Psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \Psi}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + U(r) \Psi(r, \varphi, z) = E \Psi(r, \varphi, z)$$

для волновой функции  $\Psi(r, \varphi, z)$  в области  $D = \{r > R_1, \varphi \in [0, 2\pi], z \in (-\infty, \infty)\}$ ;  $m_e$  — масса электрона. Большая величина (порядка 1 эВ) потенциального барьера, препятствующего проникновению электрона внутрь гелия, позволяет считать его бесконечным с соответствующим условием обращения в нуль волновой функции электрона при  $r = R_1$ .

После разделения переменных

$$\Psi(r, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\varphi} \chi(r) G(z).$$

Учитывая, что решение уравнения для  $G(z)$  в случае свободного движения вдоль  $z$  соответствует плоской волне, получаем уравнение для радиальной функции  $\chi(r)$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left[ \frac{\partial^2 \chi(r)}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \chi(r)}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \chi(r) \right] + U(r) \chi(r) = E_r \chi(r), \quad (4)$$

где  $E_r = E - E_z$ ,  $E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}$ ,  $k_z$  — волновое число.

В отличие от задачи для энергетического спектра электрона внутри капилляра малого радиуса [7], в которой удалось построить последовательность собственных значений оператора

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right] + U(r) \quad (5)$$

для целого набора параметров, используя разложение функции  $\chi(r)$  в ряд по степеням  $r$ , в рассматриваемой «внешней» задаче такой метод решения, к сожалению, не дает. Однако согласно общей теории спектрального анализа (см., например, [8], гл. XIII), оператор  $-\Delta + U(r)$  в предположении, что  $U$  удовлетворяет условию  $U(r) \geq -C_0 r^{-2}$  ( $C_0 = \text{const}$ ) при  $r$  больше некоторого  $R_0$ , имеет *конечный отрицательный* дискретный спектр, который может быть вычислен, к примеру, методом Релея — Ритца.

Поэтому первое собственное значение (энергия основного состояния электрона) отрицательно и конечно и может быть найдено вариационным методом.

В качестве пробной функции возьмем

$$\chi_1(r) = C(r^2 - R_1^2) \exp(-\gamma_1(r - R_1)).$$

Эта функция экспоненциально убывает при  $r \rightarrow \infty$  и обращается в нуль при  $r = R_1$ . Условие нормировки

$$\int_{R_1}^{\infty} \chi_1^2(r) r dr = 1$$

дает значение постоянной  $C$

$$C = \frac{2\sqrt{2}\gamma_1^3}{[15 + 30\gamma_1 R_1 + 24\gamma_1^2 R_1^2 + 8\gamma_1^3 R_1^3]^{1/2}} \equiv a(\gamma_1) \gamma_1^3.$$

Энергию основного состояния будем искать в виде  $E_1^{(n)} = \langle 1 | \hat{H} | 1 \rangle$ , где  $|1\rangle = \chi_1(r)$ ,  $\hat{H}$  — оператор (5). В качестве  $U(r)$  будем брать приближенное выражение (3).

Потенциальная энергия электрона равна

$$E^{\text{pot}} = \int_{R_1}^{\infty} \chi_1^2(r) U(r) r dr = -2\Lambda_0 R_1^2 a^2(\gamma_1) \gamma_1^6 \times \\ \times \int_{R_1}^{\infty} \frac{(r^2 - R_1^2)^2}{r} e^{-2\gamma_1(r - R_1)} \left( \frac{1}{r^2 - R_1^2} + \frac{1}{4R_1^2} \ln \left( 1 - \frac{R_1^2}{r^2} \right) \right) r dr - \\ - 2\Lambda_1 R_2^2 a^2(\gamma_1) \gamma_1^6 \times$$

$$\times \int_{R_1}^{\infty} \frac{(r^2 - R_1^2)^2}{r} e^{-2\gamma_1(r-R_1)} \left( \frac{1}{r^2 - R_2^2} + \frac{1}{4R_2^2} \ln \left( 1 - \frac{R_2^2}{r^2} \right) \right) r dr. \quad (6)$$

Для удобства вычислений логарифм был аппроксимирован полиномом

$$\ln(1+x) \approx a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 + a_4x^4 + a_5x^5,$$

где  $a_1 \dots a_5$  — некоторые постоянные [9].

Перейдя в интегралах (6) к переменным  $t = r/R_1$ , получим сумму слагаемых вида

$$\int_1^{\infty} t^n e^{-2\gamma_1 R_1 t} dt = \alpha_n(-2\gamma_1 R_1) \quad (7)$$

и

$$\int_1^{\infty} \frac{e^{-2\gamma_1 R_1 t}}{t^n} dt = E_n(-2\gamma_1 R_1) \quad (8)$$

в обозначениях [9], причем  $\alpha_n(z)$  и  $E_n(z)$  выражаются через  $\alpha_0(z) = e^{-z}/z$  и интегральную показательную функцию  $E_1(z)$  посредством рекуррентных соотношений. Не вписывается в эту схему только один член

$$e^{2\gamma_1 R_1} \int_1^{\infty} \frac{b^2(t^2 - 1)^2}{t^2 - b^2} e^{-2\gamma_1 R_1 t} dt, \quad b = R_2/R_1 < 1,$$

который сводится к сумме слагаемых типа (7) и интегралов

$$\int_1^{\infty} \frac{e^{-2\gamma_1 R_1 t}}{t - b} dt = e^{-2\gamma_1 R_2} E_1(2\gamma_1(R_1 - R_2)),$$

$$\int_1^{\infty} \frac{e^{-2\gamma_1 R_1 t}}{t + b} dt = e^{2\gamma_1 R_2} E_1(2\gamma_1(R_1 + R_2)).$$

Именно эти слагаемые оказываются *главными* в выражении для потенциальной энергии.

Оценки показывают, что логарифмическая добавка в функции (2) практически не сказывается на значении энергии, поэтому для приближенных оценок достаточно ограничиться первым слагаемым. Это дает выражение для потенциальной энергии

$$E^{\text{pot}} = - \frac{\Lambda_0 a^2(\zeta) \zeta^3 (1 + \zeta)}{16R_1} - \frac{\Lambda_1 a^2(\zeta) b^2}{64R_1} \times \\ \times \left\{ 4\zeta^3 + 4\zeta^4 + 2(b^2 - 1)\zeta^5 + \frac{\zeta^6 (b^2 - 1)^2}{b} \times \right. \\ \left. \times [e^{\zeta(1-b)} E_1(\zeta(1-b)) - e^{\zeta(1+b)} E_1(\zeta(1+b))] \right\}.$$

Здесь введено обозначение  $\zeta = 2\gamma_1 R_1$ , а

$$a^2(\zeta) = \frac{8}{15 + 15\zeta + 6\zeta^2 + \zeta^3}.$$

Кинетическая энергия имеет следующий вид:

$$E^{\text{kin}} = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \times \\ \times \left\{ \int_{R_1}^{\infty} \chi_1(r) \left[ r \frac{d^2 \chi_1}{dr^2} + \frac{d\chi_1}{dr} - n^2 \frac{\chi_1(r)}{r^2} \right] dr \right\} = \\ = \frac{\hbar^2 a^2(\zeta) \zeta^2}{64m_e R_1^2} \left[ 3 + 3\zeta + 2\zeta^2 + \zeta^3 + n^2 \times \right. \\ \left. \times \left( 3 + 3\zeta + \frac{\zeta^2}{2} - \frac{\zeta^3}{2} + \frac{\zeta^4}{2} e^{\zeta} E_1(\zeta) \right) \right]. \quad (9)$$

Полная энергия есть сумма потенциальной и кинетической энергии:  $E^n = E^{\text{pot}} + E^{\text{kin}}$ .

Можно показать, что при  $R_1, R_2 \rightarrow \infty$  и  $d = R_1 - R_2 \ll R_1$

$$E^n \simeq \frac{\hbar^2 \gamma_1^2}{2m_e} - \Lambda_0 \gamma_1 - \Lambda_1 \gamma_1 \times \\ \times [1 - 2\gamma_1 d - 4\gamma_1^2 d^2 e^{2\gamma_1 d} E_1(-2\gamma_1 d)].$$

Это известный результат для плоской задачи с толщиной пленки  $d$  [10].

Параметр  $\gamma_1$  определяется из условия  $dE^n/d\gamma_1 = 0$ , или, что равносильно,  $dE^n/d\zeta = 0$ . Кинетическая энергия есть возрастающая функция  $\zeta$ , потенциальная — убывающая, сумма их может иметь минимум при некотором положительном  $\zeta$  (однако при некоторых значениях параметров задачи полная энергия может быть монотонно возрастающей функцией, и тогда минимум энергии достигается при  $\zeta = 0$ ).

Вычислив производную, приравняв ее нулю и численно решив соответствующее трансцендентное уравнение, получим искомое значение  $\zeta$ . Подстановка этого значения в выражение для энергии и даст норму оператора  $\hat{H}$  — или первое собственное значение (энергию основного состояния).

На рис. 3 представлены волновые функции электрона для стеклянной нити радиуса  $R_2 = 1,5 \cdot 10^{-7}$  см, покрытой слоем гелия различной толщины. Видно, что с увеличением толщины слоя положение максимума волновой функции и, следовательно, среднее расстояние от поверхности жидкого гелия, на котором локализован электрон, увеличивается.

Результаты численного расчета энергии связи  $|E_b|$  («глубины» основного состояния) в зависимо-

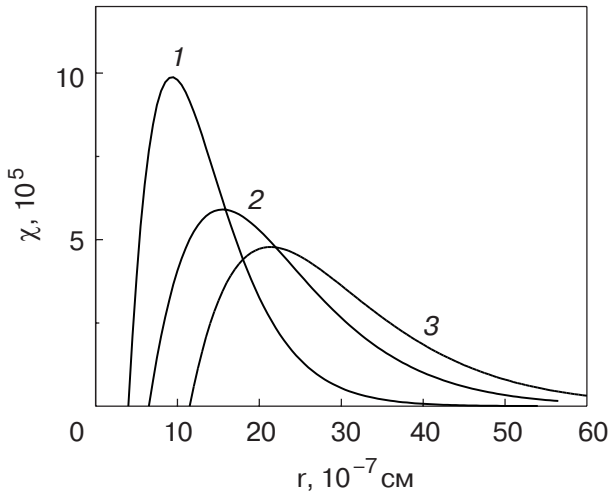


Рис. 3. Волновые функции  $\chi(r)$  для различных толщин пленки гелия, покрывающей стеклянную цилиндрическую нить,  $R_1$ ,  $10^{-7}$  см: 4 (1), 6,5 (2), 11,5 (3).  $R_2 = 1,5 \cdot 10^{-7}$  см.

сти от  $R_1$  показаны на рис. 4 в случае слоя гелия, покрывающего цилиндрическую нить из стекла (диэлектрическая постоянная  $\epsilon = 7,3$ ). Интересно отметить, что наблюдается немонотонная зависимость энергии от  $R_1$  (при расчете  $R_2 \simeq 1,5 \cdot 10^{-7}$  см). Величина  $|E_b|$  уменьшается с увеличением толщины слоя гелия, проходит минимум и начинает возрастать. Увеличение энергии связи при уменьшении  $R_1$  обусловлено тем, что усиливается влияние поляризационного взаимодействия со стеклянной нитью. В то же время при больших значениях  $R_1$  потенциальная энергия электрона

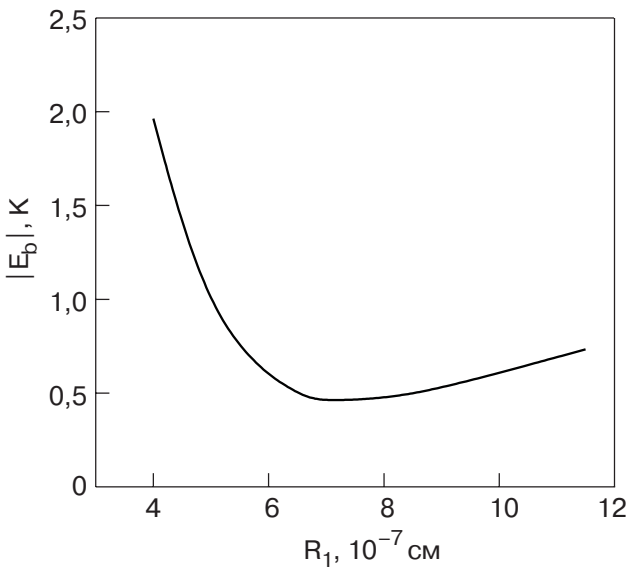


Рис. 4. Энергия связи электрона, локализованного над цилиндрической нитью из стекла, в зависимости от  $R_1$  при  $R_2 = 1,5 \cdot 10^{-7}$  см.

определяется его взаимодействием с гелием. Интенсивность этого взаимодействия растет с увеличением  $R_1$ , стремясь асимптотически к значению  $|E_b|$  над плоской поверхностью массивного гелия. Как видно на рисунке, значение  $|E_b|$  вблизи минимума оказывается существенно меньше энергии связи электрона над плоской поверхностью жидкого гелия, где она составляет приблизительно 8 К.

Заметим, что при достаточно больших значениях радиусов стеклянного стержня ( $R_2 = 5000 \text{ \AA}$ ), покрытого слоем гелия (мы брали для оценок  $d = 50 \text{ \AA}$ ), энергия основного состояния ( $n = 0$ ) составляет 353 К (потенциальная энергия вычислялась с точностью до логарифмического слагаемого). Значение такой энергии электрона над плоской поверхностью гелия при том же значении  $d$  равно 371 К.

### 3. Электрон внутри сферической полости

#### 3.1. Потенциальная энергия электрона

Для электрона, находящегося внутри полой сферы в диэлектрической среде в точке  $r, \theta, \varphi$ , энергия его взаимодействия с окружающей средой может быть записана как

$$U(r) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \int_R^\infty (r')^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \times \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{[(x'-x)^2 + (y'-y)^2 + (z'-z)^2]^2},$$

где  $x = r \sin \theta \cos \varphi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \varphi$ ,  $z = r \cos \theta$  и аналогично для переменных со штрихами. Предполагается, что центр сферы расположен в точке  $r = 0$ . Преобразуя знаменатель в последнем интеграле, получаем:

$$U(r) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \int_R^\infty (r')^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \times \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{[r'^2 + r^2 - 2rr'(\cos \theta' \cos \theta + \sin \theta' \sin \theta \cos(\varphi - \varphi'))]^2}.$$

В частности, при  $r = 0$

$$U(0) = -\frac{\Lambda_0}{\pi} \int_R^\infty (r')^2 dr' \int_0^\pi \sin \theta' d\theta' \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi'}{r'^2} = -\frac{4\Lambda_0}{R}. \tag{10}$$

Это значение будет использовано в дальнейшем.

### 3.2. Приближение для потенциальной энергии электрона внутри сферы радиуса $R$

Рассмотрим вначале электрон внутри *металлической* ( $\varepsilon \rightarrow \infty$ ) сферы радиуса  $R$ . Потенциальная энергия такого электрона есть [11]

$$U(r) = -\frac{2\Lambda_0 R}{R^2 - r^2} + \tilde{U}_0, \quad (11)$$

$$\Lambda_0 = \frac{e^2}{4} \left( \frac{\varepsilon - 1}{\varepsilon + 1} \right) \Bigg|_{\varepsilon \rightarrow \infty} = \frac{e^2}{4},$$

$\tilde{U}_0$  — некоторая постоянная. При записи (11) мы использовали выражение для  $\Lambda_0$  как функции  $\varepsilon$  [1,7].

Выражение (11) удобно разложить в ряд по степеням  $(r/R)$ . В результате получаем:

$$U(r) = -\frac{e^2 R}{2(R^2 - r^2)} + \tilde{U}_0 = -\frac{e^2}{2R} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{r}{R} \right)^{2n} + \tilde{U}_0.$$

Сила, действующая на электрон, есть

$$F_r = -\frac{\partial U(r)}{\partial r} = \frac{e^2}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} n \left( \frac{r}{R} \right)^{2n+1}. \quad (12)$$

В более общем случае сила, действующая на электрон внутри сферы в среде с *произвольной* диэлектрической постоянной  $\varepsilon$ , есть [11]

$$F_{r,\varepsilon} = \frac{(\varepsilon - 1)e^2}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n(n+1)}{n + \varepsilon(n+1)} \left( \frac{r}{R} \right)^{2n+1} =$$

$$= 4(\varepsilon + 1) \frac{\Lambda_0}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n(n+1)}{n + \varepsilon(n+1)} \left( \frac{r}{R} \right)^{2n+1}. \quad (13)$$

При  $\varepsilon \rightarrow \infty$  это дает

$$F_{r,\varepsilon} \rightarrow \frac{e^2}{r^2} \sum_{n=0}^{\infty} n \left( \frac{r}{R} \right)^{2n+1} \equiv F_{r,\infty},$$

что совпадает с выражением (12). Из (13) путем интегрирования получаем

$$U_\varepsilon(r) = -2(\varepsilon + 1) \frac{\Lambda_0}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)}{n + \varepsilon(n+1)} \left( \frac{r}{R} \right)^{2n} + U_0,$$

здесь  $U_0$  — постоянная интегрирования. При  $r = 0$  имеем:

$$U(0) = U_0 - \frac{2(\varepsilon + 1)\Lambda_0}{\varepsilon R}.$$

Сравнивая это со значением (10), находим

$$U_0 = -\frac{2(\varepsilon - 1)\Lambda_0}{\varepsilon R}.$$

Тогда

$$U_\varepsilon(r) = -\frac{2(\varepsilon - 1)\Lambda_0}{\varepsilon R} - \frac{2(\varepsilon + 1)\Lambda_0}{R} \times$$

$$\times \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(n+1)}{n + \varepsilon(n+1)} \left( \frac{r}{R} \right)^{2n}. \quad (14)$$

Легко видеть, если предположить, что и для металла

$$U(0) = -\frac{4\Lambda_0}{R} \Bigg|_{\varepsilon \rightarrow \infty} = -\frac{e^2}{R},$$

то выражение (14) при  $\varepsilon \rightarrow \infty$  переходит в (11), где  $\tilde{U}_0 = -e^2/2R$ .

Рассмотрим сферический пузырек в жидком гелии. Для потенциала  $U(r)$  верна общая формула (14). Однако, как нетрудно убедиться, при значении  $\varepsilon = 1,0572$ , соответствующем жидкому гелию, приближенная формула (11) при условии (10) в диапазоне  $r \in [0, R)$  дает значения, близкие к точным (14) (максимальное отличие, примерно 10%, наблюдается при  $r/R \approx 0,85$ ). Поэтому можно использовать приближенное выражение

$$U(r) = -\frac{2\Lambda_0}{R} - \frac{2\Lambda_0 R}{R^2 - r^2} \quad (15)$$

для потенциальной энергии электрона, находящегося внутри сферической полости радиуса  $R$  в жидком гелии.

### 3.3. Энергия электрона в гелиевом пузырьке

Уравнение Шредингера в сферических координатах имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} \right] \right\} - \frac{2\Lambda_0}{R} \left( 1 + \frac{R^2}{R^2 - r^2} \right) \Psi = E\Psi,$$

где  $\Psi = \Psi(r, \theta, \varphi)$ . Для центрально-симметричного движения

$$-\left[ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] = l(l+1),$$

$l = 0, 1, 2, \dots$  [12], поэтому уравнение можно переписать как

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \Psi \right\} -$$

$$-\frac{2\Lambda_0}{R} \left( 1 + \frac{R^2}{R^2 - r^2} \right) \Psi = E\Psi.$$

Решение будем искать в виде произведения  $\Psi(r, \theta, \varphi) = f(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$ , где

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^{m+|m|} \times \\ \times i^l \left[ \frac{(2l+1)}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\varphi},$$

$P_l^{|m|}(\cos \theta)$  — присоединенный полином Лежандра,  $|m| \leq l$ , а для  $f(r)$  получаем уравнение

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f(r)}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} f(r) \right\} - \\ - \frac{2\Lambda_0}{R} \left( 1 + \frac{R^2}{R^2 - r^2} \right) f(r) = E_l f(r). \quad (16)$$

Уравнение оказалось *не зависящим* от  $m = l_z$ , что означает  $(2l+1)$ -кратное вырождение уровней энергии по направлениям момента.

Перейдем к безразмерным переменным  $\rho = r/R$  и обозначим

$$\frac{2m_e R^2}{\hbar^2} E_l = \lambda_l, \quad \frac{2m_e R^2}{\hbar^2} \frac{2\Lambda_0}{R} = A.$$

Тогда уравнение (16) примет вид

$$\frac{1}{\rho^2} \left( 2\rho \frac{\partial f}{\partial \rho} + \rho^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \rho^2} \right) + A \left( 1 + \frac{1}{1-\rho^2} \right) f + \lambda_l f = 0$$

или, после умножения на  $\rho^2(1-\rho^2)$ ,

$$\rho^2(1-\rho^2) \frac{\partial^2 f(\rho)}{\partial \rho^2} + 2\rho(1-\rho^2) \frac{\partial f(\rho)}{\partial \rho} + \\ + [-(A + \lambda_l)\rho^4 + (2A + l(l+1) + \lambda_l)\rho^2 - \\ - l(l+1)] f(\rho) = 0. \quad (17)$$

Решение будем искать в виде ряда

$$f(\rho) = \rho^\mu \left( 1 + \sum_{k=1}^{\infty} c_k \rho^k \right). \quad (18)$$

Параметр  $\mu$  находится из определяющего уравнения [13]

$$\mu(\mu-1) + 2\mu - l(l+1) = 0,$$

откуда  $\mu_1 = l$ ,  $\mu_2 = -l-1$ . Поскольку второе значение дает решение, *не ограниченное в нуле*, то остается только одно значение  $\mu = l$ . Подставляя разложение (18) в уравнение (17) и приравнявая нулю коэффициенты при степенях  $\rho$ , получаем рекуррентную формулу для коэффициентов:

$$c_{2k+2} = \\ = \frac{(A + \lambda_l)c_{2k-2} - (2A + \lambda_l - 4kl - 2k(2k+1))c_{2k}}{4(k+1)l + (2k+2)(2k+3)}.$$

Все нечетные коэффициенты равны нулю. Собственные значения  $\lambda_l$  получаются из граничного условия  $f(R) = 0$ , т.е. определяются как корни ряда  $c_0 + c_2 R^2 + c_4 R^4 + \dots = 0$ .

При анализе энергии электрона внутри сферического пузырька к энергии  $E_l$ , входящей в правую часть соотношения (16), следует добавить поверхностную энергию  $E_s = 4\pi\sigma R^2$  ( $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения). Именно влияние этой энергии ведет к минимуму полной энергии  $E_{\text{sph}} = E_l + E_s$ , положение которого как функция  $R$  определяет значение радиуса пузырька.

На рис. 5 показана зависимость  $E_{\text{sph}}$ , рассчитанная для  $E_l$ , определенная при численном решении уравнения Шредингера (16) с потенциальной энергией (15) (кривая 1). Для сравнения на том же рисунке показана эта же энергия, но рассчитанная в приближении

$$E_l(R) \simeq \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_e^2 R},$$

в котором потенциальной энергией взаимодействия электрона с окружающей средой пренебрегается (кривая 2) [14]. Как видно на рис. 5, зависимости  $E_{\text{sph}}(R)$ , рассчитанные в обоих приближениях, ка-

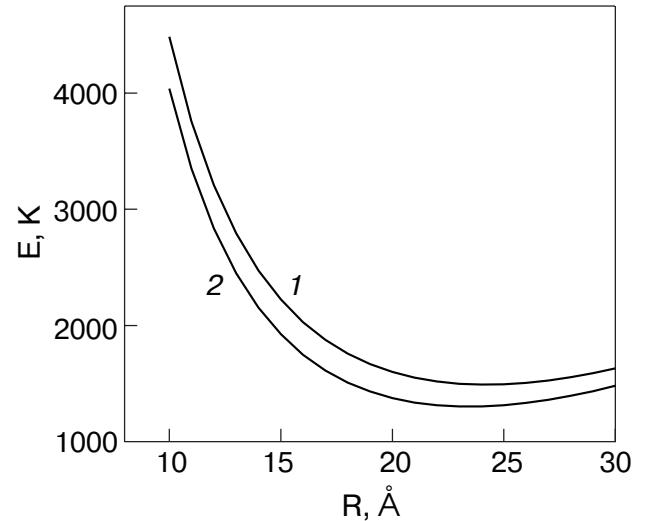


Рис. 5. Энергия основного состояния электрона в сферической полости внутри жидкого гелия как функция радиуса. Кривая 1 — результат решения волнового уравнения (16) с потенциальной энергией (15), кривая 2 проведена в пренебрежении потенциальной энергией взаимодействия с окружающей средой. Положения минимумов на обеих кривых составляют 23 и 24 Å соответственно.

чеством похожи, хотя значения минимума энергии слегка отличаются.

Таким образом, проведенное рассмотрение показывает, что для электрона в гелии влияние потенциальной энергии  $U(r)$  на энергию электрона и на ее зависимость от радиуса сферы не очень велико. Оценки, однако, показывают, что такое влияние оказывается заметно больше для вещества с диэлектрической постоянной  $\epsilon_s$ , значительно превышающей единицу. Поэтому рассмотрение, проведенное в настоящей работе, следует считать более строгим, позволяющим оценить энергию электрона и радиус сферической полости, в которой он локализован, для широкого класса веществ.

Радиус электронного пузырька в жидком гелии задается поверхностным натяжением и внешним давлением. Однако если в полую сферу диэлектрика сконденсировать небольшое количество гелия, то в зависимости от радиуса полости диэлектрика и количества жидкого гелия, покрывающего стенки диэлектрика, можно создать пузырьки различного радиуса. Отметим, что при достаточно большом количестве сконденсированного гелия можно получить сравнительно толстые слои в диэлектрической сфере, так что для расчета энергии электрона влиянием диэлектрика можно пренебречь.

На рис. 6 показана зависимость волновых функций, являющихся решением (16), как функции  $r$  для пяти значений радиуса сферического слоя гелия. Видно, что при малых  $R$  максимум волновой функции находится в центре полости. С увеличением  $R$  этот максимум смещается к стенке сферической

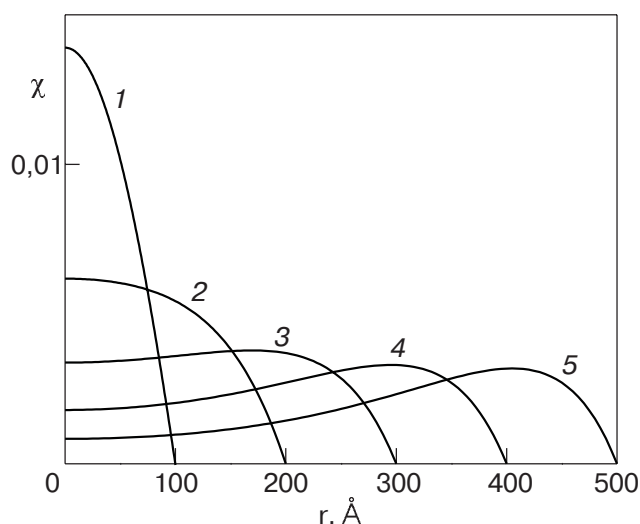


Рис. 6. Волновые функции электрона, локализованного внутри сферического пузырька в гелии, как функция расстояния  $r$  от центра пузырька для нескольких значений его радиуса  $R$ , Å: 100 (1), 200 (2), 300 (3), 400 (4), 500 (5).

полости. Действительно, для больших  $R$  потенциальная энергия

$$U(r) \simeq -\frac{\Lambda_0}{R-r},$$

что соответствует потенциальной энергии электрона, находящегося на расстоянии  $x = R - r$  от плоскости. В этих условиях решение (16) должно асимптотически стремиться к результатам соответствующей «плоской» задачи [1]. Такая тенденция хорошо видна на рис. 5.

### Заключение

В настоящей работе проведен расчет энергетического спектра поверхностных электронов в сферической полости и вблизи диэлектрической нити, покрытой слоем жидкого гелия либо отвердевшим водородом или неоном. Полученные результаты заметно расширяют представления об основных свойствах поверхностных электронов в пористых средах по сравнению с ранее изученным авторами случаем локализации носителей внутри наноканалов цилиндрической формы [7]. Отметим, что, как показывают оценки, суммарная энергия связи со средой электрона, находящегося внутри пористого вещества, стенки которого покрыты гелиевой пленкой, больше аналогичной величины для электрона, находящегося вне среды, вблизи границы пористого вещества и вакуума. Поэтому электрону энергетически выгодно проникать внутрь пористой среды.

В материалах, содержащих полости, близкие к сферическим, электроны, по-видимому, будут скапливаться в основном в полостях. Это связано с тем, что длины каналов, которые их соединяют, много меньше среднего радиуса полостей. Спектр и волновые функции электронов зависят от радиуса полости: электрон в сфере малого радиуса будет локализоваться в центре, как это имеет место в электронном пузырьке в жидком гелии (а также водороде и неооне), где влияние стенки полости будет сказываться незначительно. При увеличении радиуса гелиевой полости влияние стенки будет возрастать, и при больших значениях радиуса электрон будет локализоваться в основном возле поверхности гелия. При увеличении числа электронов в сферической полости электрон будет «выдавливаться» в каналы, соединяющие полости, в системе появится проводимость, поведение которой будет зависеть от числа электронов и соотношения между радиусами полостей и соединяющих их каналов.

В пористых средах типа аэрогелей поведение электронов будет несколько иным. При малых толщинах гелиевой пленки энергия связи электрона с покрытой гелием нитью достигает 0,5–2 К, и при



достаточно низких температурах электроны будут локализоваться на нитях, реализуя одномерную или квазиодномерную систему. Электроны при этом будут двигаться вдоль нитей. При некоторых толщинах гелиевой пленки их связь с нитями становится сравнительно малой, и при конечных температурах локализации на нитях происходить не будет. В этом случае электроны будут двигаться, рассеиваясь на атомах гелия в паре и нитях. Представляет интерес изучение влияния тепловых колебаний нитей на движение электронов.

Электроны в пористых средах в силу кулоновского отталкивания будут скапливаться вблизи границы пористая среда – вакуум (пар). Этим процессом можно управлять, прикладывая внешнее электрическое поле, перпендикулярное плоскости границы раздела пористая среда – вакуум (пар). Электроны в этом случае будут локализоваться вблизи границы раздела, но уйти из пористой среды не смогут, так как существует потенциальный барьер, препятствующий их уходу. В этом случае будет образовываться своеобразная двумерная система. Энергетические уровни этой системы, отвечающие движению электронов перпендикулярно границе раздела, будут во многом аналогичны тем, которые имеют место для поверхностных электронов над жидким гелием в сильном прижимающем поле [1]. Исследование кинетических характеристик такой системы представляет значительный интерес, поскольку может дать информацию как об особенностях движения электронов в разупорядоченной среде, так и об особенностях взаимодействия электронов с тепловыми колебаниями нитей в случае аэрогеля.

1. В.Б. Шикин, Ю.П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Наука, Москва (1989).
2. P.M. Platzman and M.I. Dykman, *Science* **284**, 1967 (1999).
3. Ю.З. Ковдря, Ю.П. Монарха, *ФНТ* **12**, 1011 (1986).
4. Ю.З. Ковдря, В.А. Николаенко, *ФНТ* **18**, 1278 (1992).
5. С.П. Гладченко, В.А. Николаенко, Ю.З. Ковдря, С.С. Соколов, *ФНТ* **27**, 3 (2001).

6. S. Sokolov and N. Studart, in: *Two-Dimensional Electronic Systems*, E. Andrei (ed.), Kluwer Academic Publ., Dordrecht (1997).
7. Т.И. Зуева, Ю. З. Ковдря, С. С. Соколов, *ФНТ* **32**, 115 (2006).
8. М. Рид, Б. Саймон, *Методы современной математической физики, Анализ операторов*, т. 4, Мир, Москва (1982).
9. *Справочник по специальным функциям*, М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.), Наука, Москва (1979).
10. С.С. Соколов, *ФНТ* **30**, 271 (2004).
11. В. Смайт, *Электростатика и электродинамика*, Изд-во иностр. лит., Москва (1954).
12. Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).
13. Э. Камке, *Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям*, Наука, Москва (1971).
14. R.A. Ferrel, *Phys. Rev.* **108**, 167 (1957).

### Surface electrons over liquid helium in porous media

T.I. Zueva, Yu.Z. Kovdrya, and S.S. Sokolov

The energy spectrum of electrons localized near the surface of liquid helium in porous media is investigated theoretically. We consider a situation where an electron is located over a thin wire covered by a helium film. The localization of an electron inside of a spherical cavity with walls covered by helium is also considered. The ground state energies and the relevant wave functions for an electron over a cylindrical wire are calculated by using the variational approach. For the electron localized in the spherical cavity the eigenvalues of energy and wave functions are calculated with the use of numerical solution of the wave equation. The results obtained generalize the previous data, on electron energy spectrum inside of nanotube and extend the conception available on the properties of electrons in porous media partially filled by helium.

**Keywords:** porous media, nanotubes, wave functions.