

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА ПОВЕРХНОСТИ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ В ПОТЕНЦИАЛЕ ПРИМЕСИ

П.Д.Григорьев¹⁾

*Институт теоретической физики им.Л.Д.Ландау РАН
142432, Черноголовка, Московской обл., Россия*

*Max-Planck-Institut für Festkörperforschung
BP166, F-38042 Grenoble, France*

Поступила в редакцию 5 июля 1997 г.

После переработки 1 октября 1997 г.

Вычисляются уровни энергии и ширина уровней электрона на примесных центрах с учетом деформации поверхности гелия. Сдвиг уровней, связанный с деформационными эффектами, невелик и очень медленно уменьшается с ростом номера уровня. Однако даже это малое смещение уровней энергии относительно друг друга сказывается на риплонном рассеянии, которое вносит основной вклад в ширину уровней при низких температурах. Теоретически предсказывается очень сильная зависимость этой ширины от внешних параметров и от номера уровня, а также наличие максимума при прижимающем поле $E_{\perp} = 1500 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$. Ширина уровней электрона в связанном состоянии оказалась меньше, чем для свободных электронов, что позволяет провести красивый спектроскопический эксперимент.

PACS: 67.40.-w

Поведение электронов на поверхности гелия изучается уже почти 20 лет, и обширный анализ возникающих здесь явлений можно найти в книге [1]. В настоящей работе решается одночастичная задача об электроне в потенциале примеси. Эта тема оказывается важной, поскольку рассеяние на неоднородностях подложки и, особенно, локализация на положительных ионах сильно влияют на динамические свойства поверхностных электронов [2] и на коллективные эффекты в двумерной системе, которую они образуют.

Если на некотором расстоянии от поверхности гелия имеется положительно заряженная примесь, то электроны образуют связанные состояния около нее. Устойчивость такой системы была исследована в работе [3], где положение примеси определялось как результат конкуренции силы изображения, отталкивающей примесь от границы гелий – воздух, и кулоновской силы притяжения примеси к электрону на поверхности. В нашем случае, примесь покоится на дне сосуда, так как ее удерживает гораздо большая сила электростатического изображения на границе гелий – подложка (диэлектрическая проницаемость материала подложки обычно больше проницаемости гелия). Кроме того, положение примесей и их концентрацию можно задавать по собственному желанию, освещая подложку лазером. В этом случае вопрос о равновесном положении примеси отпадает.

Аналогичные связанные состояния возникают на границе двух полупроводников, для которых Винтер [4] численными методами нашел уровни энергии и примерный вид волновых функций связанных состояний для небольших расстояний от примеси

¹⁾ e-mail: pashag@itp.ac.ru

до поверхности, $d < 60 \text{ \AA}$. В гелии ситуация несколько иная. Во-первых, диэлектрическая проницаемость гелия очень близка к единице и силы изображения не настолько сильны. Во-вторых, электроны над гелием взаимодействуют с риплонами и с паром гелия, что приводит в данной задаче к уширению уровней. В-третьих, возникает статическая деформация поверхности гелия, которая влияет на положение уровней.

Уровни энергии и волновые функции. Без учета процессов рассеяния и статической деформации поверхности, которые будут подробно рассмотрены ниже, электрон находится в потенциале [1]

$$V = eFz - \frac{e^2 \varepsilon - 1}{4z \varepsilon + 1} - \frac{e^2}{4(d+z)} \frac{\varepsilon_s - 1}{\varepsilon_s + 1} + V_o \theta(-z) - \frac{e^2 Z_{ef}}{\sqrt{(d+z)^2 + x^2 + y^2}},$$

где диэлектрическая проницаемость гелия $\varepsilon = 1.045$. Эффективный заряд примеси $Z_{ef} = \frac{2}{\varepsilon+1} \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_s+\varepsilon} Z$. Даже без внешнего поля ($F = 0$) электрон очень сильно прижимается к поверхности (среднее расстояние до поверхности $\langle z \rangle < 100 \text{ \AA}$), так что $\langle z \rangle / d \ll 1$. Поэтому последний член, соответствующий примеси, можно считать не зависящим от координаты z , а только от ее усредненного значения \bar{z} . Такое приближение хорошо работает еще и потому, что потенциал примеси является малой поправкой к потенциалу вдоль оси z (но отнюдь не в плоскости, параллельной поверхности гелия). Теперь переменные разделяются; волновая функция $\psi(x, y, z) = \zeta(z)f(x, y)$, где $\zeta(z)$ и $f(x, y)$ удовлетворяют уравнениям:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + eFz - \frac{e^2 \varepsilon - 1}{4z \varepsilon + 1} - \frac{e^2 \varepsilon_s - 1}{4d \varepsilon_s + 1} + V_o \theta(-z) - E_n \right) \zeta(z) = 0, \quad (1)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) - \frac{e^2 Z_{ef}}{\sqrt{d^2 + x^2 + y^2}} - E_{kl} \right) f(x, y) = 0. \quad (2)$$

В последнем уравнении введено обозначение $d = d + \bar{z}$, где $\bar{z} \simeq \langle z \rangle = \int \zeta^*(z) \zeta(z) z dz$. В отсутствие поля $\langle z \rangle = a = 3\hbar^2 / 2m\alpha \approx 100 \text{ \AA}$, $\alpha = (\varepsilon - 1)e^2 / 4(\varepsilon + 1)$. При очень сильных полях на нижней подзоне $\langle z \rangle = b \approx 1.6 (\hbar^2 / 2meF)^{1/3}$. В силу сказанного, $\bar{z} = (a^{-2} + b^{-2})^{-1/2}$ даст неплохую точность (ошибка $\leq 1\%$ к значению d).

Расстояние между подзонами (уровнями энергии по оси z) около 30 К, и при низких температурах электрон "замерзает" на нижней подзоне. Поэтому двумерное поведение электрона определяется уравнением (2), которое выглядит просто, но точно не решается. Для нижних уровней область локализации $\langle x^2 \rangle \sim \langle y^2 \rangle \sim 200 \text{ \AA}$, и можно устроить разложение по параметру $\langle x^2 + y^2 \rangle / d^2$. Тогда потенциал примет вид

$$V = \frac{Z_{ef} e^2}{d} \left(-1 + \frac{r^2}{2d^2} - \frac{3}{8} \left(\frac{r^2}{d^2} \right)^2 + \frac{5}{16} \left(\frac{r^2}{d^2} \right)^3 - \dots \right).$$

В нулевом порядке теории возмущений имеем двумерный осциллятор с $\omega = \sqrt{Z_{ef} e^2 / d^3 m} \approx (4 \text{ К}) \sqrt{Z_{ef}}$.

Как мы увидим, следующие поправки будут очень важны при определении ширины уровней. Чтобы их вычислить, воспользуемся теорией возмущений. Потенциал вида r^{2n} не диагонален в базисе волновых функций

$$f_{kl}(x, y) = \left(\frac{m\omega}{\pi \hbar} \right)^{1/2} \frac{1}{\sqrt{2^{k+l} k! l!}} e^{-(x^2+y^2)/2a^2} H_k \left(\frac{x}{a} \right) H_l \left(\frac{y}{a} \right).$$

Поэтому удобнее классифицировать состояния по проекции момента m . Тогда волновые функции выразятся через вырожденную гипергеометрическую функцию:

$$f_{nm}(r, \phi) = C_{nm} e^{-x/2} x^{m/2} F(-n, m+1, x) e^{im\phi}$$

где радиальное квантовое число $n = 0, 1, \dots$, а $x = r^2 \sqrt{\frac{Z_{ef} e^2 m_e}{d^3 \hbar^2}}$. В первом порядке поправка к уровням энергии дается интегралом

$$E_{kl}^{(1)} = V_{(nm)(nm)}^{(1)} = \int f_{nm}^2(r, \phi) \left(-\frac{3 Z_{ef} e^2}{8 d^2} \right) \left(\frac{r}{d} \right)^4 r dr d\phi$$

Интегралы такого типа легко вычисляются [5, Приложение f]. Конечный ответ:

$$E_{nm}^{(1)} = -\frac{3 \hbar^2 (m+2)(m+1)}{8 m_e d^2} \left[1 + \sum_{s=0}^{n-1} \frac{n(n-1) \dots (n-s)(-3-s)(-2-s) \dots (-2+s)}{[(s+1)!]^2 (m+1)(m+2) \dots (m+s)} \right] \times \\ \times \left[1 + \sum_{s=0}^{n-1} \frac{n(n-1) \dots (n-s)(-1-s)(-s) \dots (s)}{[(s+1)!]^2 (m+1)(m+2) \dots (m+s)} \right]^{-1}. \quad (3)$$

Для второго уровня вычисленная по этой формуле поправка к энергии

$$E_{10}^{(1)} = -\frac{3}{4} \frac{7 \hbar^2}{m_e d^2} \quad \text{и} \quad E_{02}^{(1)} = -\frac{3}{4} \frac{6 \hbar^2}{m_e d^2}.$$

Теория возмущений работает, если $\hbar(n^2 + m^2 + 1)/2e\sqrt{mdZ_{ef}} \ll 1$, что для $d = 500 \text{ \AA}$ выполняется довольно неплохо для 6 нижних уровней.

Деформационные эффекты. Под действием прижимающего поля электрон оказывает давление на поверхность гелия, вызывая ее деформацию. Эта статическая деформация поверхности, имеющая форму лунки, действует обратно на электрон и локализует его в области [1, 6] $L = 4\pi\alpha\hbar^2/m_e^2 E_{\perp}^2$, где $E_{\perp} = E_0 + e/d^2$ есть сумма внешнего поля и поля примеси. Выигрыш в энергии при образовании лунки $W = -\frac{e^2 E_{\perp}^2}{4\pi\alpha} \ln \frac{1}{\kappa L}$ того же порядка, что и поправка $E^{(1)}$ первого порядка теории возмущений по $(r/d)^2$. Причем W слабо зависит от номера уровня электрона. Поэтому статическую деформацию поверхности можно считать возмущением и исследовать только в первом порядке.

Добавка к энергии от образования лунки $W = \int d^2 r \frac{\alpha}{2} [(\nabla\xi)^2 + \kappa^2 \xi^2] - eE_{\perp} |\Psi|^2 \xi$. Нам не нужно решать самосогласованную задачу о нахождении $\xi(r)$ и $|\Psi(r)|^2$, как это делали в [1] и [6], поскольку в первом порядке волновая функция электрона $\Psi(r)$ не зависит от деформации поверхности $\xi(r)$, а только от номера уровня в потенциале примеси. Функция $\xi(r)$, минимизирующая W , дается уравнением $\alpha \xi''(r) + \frac{\alpha}{r} \xi' - \rho g \xi = eE_{\perp} |\Psi(r)|^2$. Решение этого уравнения

$$\xi(r) = \frac{1}{\alpha} \int_0^{\infty} G(\omega) J_0(\omega r) \omega d\omega, \quad (4)$$

где

$$G(\omega) = \frac{P(\omega)}{\omega^2 + \kappa^2}, \quad P(\omega) = \int_0^{\infty} eE_{\perp} |\Psi(r)|^2 J_0(\omega r) r dr. \quad (5)$$

Для основного состояния электрона с волновой функцией $|\Psi(r)|^2 = 1/\pi a^2 \exp(-r^2/a^2)$,

$$G(\omega) = \frac{eE_{\perp}}{2\pi(\omega^2 + \kappa^2)} \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{4}\right) \Rightarrow \xi(0) \approx \frac{eE_{\perp}}{4\pi\alpha} \ln \frac{4}{\gamma\kappa^2 a^2}$$

($\gamma = 1,78$)^[6]. Поскольку $\ln(\kappa^2 a^2) \gg 1$, то $\xi''(0) = 2eE_{\perp}/\pi\alpha a^2 \ll \xi(0)/2a^2 \Rightarrow \xi(r)$ начинает существенно меняться на масштабах, больших области локализации электрона и далее монотонно спадает до нуля на масштабах $1/\kappa = 0.05$ см: $\xi(r) |_{r \rightarrow \infty} \approx eE_{\perp} K_0(\kappa r)/2\pi\alpha$. Сдвиг нижнего уровня $W_{00} \approx eE_{\perp} \xi(0) \approx 0.7$ К при $E_{\perp} = 3000$ В·см⁻¹. Это вполне существенная поправка, однако она все равно много меньше расстояния между уровнями нулевого приближения, так что теория возмущений остается применимой. Посмотрим, как деформационная поправка зависит от номера уровня.

Из уравнения (4) следует, что $G(\omega)$ и $\xi(r)$ линейно зависят от $|\Psi(r)|^2$. Поэтому, дифференцируя (5) по параметру $1/a^2$, можно получить значения $\xi(0)$ для разных уровней. Для уровня $n_r = 0, m = 1$,

$$\begin{aligned} |\Psi(r)|_{01}^2 &= \frac{1}{\pi a^4} r^2 e^{-r^2/a^2} = -\frac{1}{a^4} \frac{\partial}{\partial(1/a^2)} (a^2 |\Psi|_{00}^2) \Rightarrow \\ G_{01} &= \frac{eE_{\perp}}{2\pi(\omega^2 + \kappa^2)} \frac{-1}{a^4} \frac{\partial}{\partial(1/a^2)} \left[a^2 \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{4}\right) \right] = \\ &= \frac{eE_{\perp}}{2\pi(\omega^2 + \kappa^2)} \left(1 - \frac{a^2\omega^2}{4}\right) \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{4}\right) \Rightarrow \xi_{01} = \xi_{00} - \frac{eE_{\perp}}{4\pi\alpha}. \end{aligned}$$

Разница смещений первого и нулевого уровней меньше смещения каждого в $\ln(4/\gamma\kappa^2 a^2) \approx 22$ раза, но даже незначительный сдвиг уровней относительно друг друга может сказаться на их ширине, которая как мы увидим, очень чувствительна к расстоянию между подуровнями расщепленного уровня. Вычислим деформационную поправку для разных подуровней второго уровня:

$$\begin{aligned} G_{02} &= \frac{eE_{\perp}}{2\pi(\omega^2 + \kappa^2)} \left(1 - \frac{a^2\omega^2}{2} + \frac{a^4\omega^4}{32}\right) \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{4}\right) \Rightarrow \xi_{02} = \xi_{00} - \frac{3}{2} \frac{eE_{\perp}}{4\pi\alpha} \\ G_{10} &= \frac{eE_{\perp}}{2\pi(\omega^2 + \kappa^2)} \left(1 - \frac{a^2\omega^2}{2} + \frac{a^4\omega^4}{16}\right) \exp\left(-\frac{a^2\omega^2}{4}\right) \Rightarrow \xi_{10} = \xi_{00} - \frac{eE_{\perp}}{4\pi\alpha}. \end{aligned}$$

Поправка к энергии $W_{02} = W_{00} + 3(eE_{\perp})^2/2(4\pi\alpha)$, $W_{10} = W_{00} + (eE_{\perp})^2/4\pi\alpha$. Деформационные эффекты увеличивают расстояние между подуровнями второго уровня, что заметно уменьшает его риплонную ширину. Проведенные вычисления подтвердили, что деформационная поправка к энергии очень медленно уменьшается с ростом номера уровня.

Ширина уровней. Основной вклад в ширину уровней вносит рассеяние на атомах пара гелия и на риплонах. В случае свободных электронов ширина переходов между подзонами, обусловленная рассеянием на атомах, была найдена как теоретически, так и экспериментально в работе [7]. Для связанных электронов ход рассуждений не меняется и ответ отличается только коэффициентом, близким к единице. Рассеяние на паре приводит к ширине $\hbar\Delta\omega = m_e N_G U_G^2 / 2\hbar^2 a$, где U_G связана с сечением рассеяния электрона на атоме формулой $A = m^2 U_G^2 / \pi \hbar^4 \approx 5 \cdot 10^{-16}$ см², область

локализации $a = \sqrt{\hbar/m\omega}$, а концентрация пара очень быстро спадает при понижении температуры, $N_G = (Mk_B T/2\pi\hbar^2)^{3/2} \exp(-Q/k_B T)$, где $Q = 7.17$ К. При $T = 1$ К $N_G = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и $\Gamma \approx 0.01$ К.

Для свободных электронов риплонная ширина перехода между подзонами, численными методами найденная Т. Ando [8], уменьшается с температурой медленнее, чем ширина, обусловленная рассеянием на атомах. Поэтому рассеяние на риплонах становится определяющим при $T < 0.8$ К.

Рассмотрим ширину дискретных уровней электрона в потенциале примеси. Здесь имеются существенные различия со случаем свободных электронов, поэтому проведем расчет с самого начала. Оператор электрон-риплонного взаимодействия для переходов внутри одной подзоны в линейном приближении по вертикальному смещению поверхности ξ , согласно [1], имеет следующий вид: $\hat{V}^R = \int d^2r \psi^+(r)\psi(r) \sum_q \xi_q e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} V(q)$, где $\xi_q = Q(q)(b_q + b_{-q}^+)$, $Q(q) = (\hbar q \text{th}(qd)/2\rho\omega_q)^{1/2}$, и

$$V(q) = \int \frac{(\varepsilon - 1)e^2 q}{4(\varepsilon + 1)z} \left(\frac{1}{qz} - K_1(qz) \right) \zeta^2(z) dz + eE_{\perp}.$$

Первый член в $V(q)$ возникает от искажения сил изображения, а второй от прижимающего поля. Эти вклады сравниваются при $E_{\perp} = 300 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$. Поэтому заменим первое слагаемое на $eE_{ef} = 300 \text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$ и введем обозначение $F = E_{\perp} + E_{ef}$.

Чтобы найти ширину, вычислим вероятности перехода электрона на другие уровни и просуммируем эти вероятности:

$$\Gamma_n^R = 2\pi \sum_m \int \frac{d^2q}{(2\pi)^2} \langle (b_q + b_{-q}^+)(b_{-q} + b_q^+) \rangle Q^2(q) |V_{mn}^R|^2 \delta(E_m + \omega(q) - E_n).$$

Матричный элемент $V_{mn}(q) = \int \psi_m(r)\psi_n(r)e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} d^2r V(q)$ очень быстро уменьшается при $q \rightarrow \infty$. Если в качестве $\psi(r)$ взять невозмущенные собственные функции осциллятора, то $V_{mn}(q) \sim e^{-q^2 a^2/4}$. Анализ точного решения уравнения Шредингера не меняет этой оценки. Таким образом надо учитывать взаимодействие только с длинноволновыми риплонами, энергия которых не сильно превышает $\hbar\omega(q = 2/a) \approx 0.02$ К, но равна разности энергий между уровнями. Если бы мы действительно имели гармонический осциллятор, то таких бы уровней не было и риплонная ширина была бы ничтожно малой. Это не так из-за расщепления вырожденных уровней осциллятора, причем ширина очень сильно зависит от величины этого расщепления. Заметим, что основной уровень был невырожден и поэтому не расщепился, а первый был вырожден только по проекции момента и тоже не расщепился в потенциале вида r^{2k} . Вычислим риплонную ширину второго уровня. Волновые функции электрона

$$\psi_{02} = \frac{1}{\sqrt{2\pi a^2}} e^{-r^2/2a^2} \left(\frac{r}{a}\right)^2 e^{im\phi}, \quad \psi_{10} = \frac{1}{\sqrt{\pi a^2}} e^{-r^2/2a^2} \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right).$$

Матричный элемент

$$|V_{(10)(02)}^R|^2 = (eF)^2 \exp\left(-\frac{q^2 a^2}{2}\right) \frac{(qa)^4}{8} \left(1 - \frac{q^2 a^2}{8}\right)^2$$

и ширина второго уровня

$$\Gamma_2^R = \frac{(eF)^2}{\alpha} \frac{2n_q + 1}{24} \exp\left(-\frac{q_0^2 a^2}{2}\right) (q_0 a)^4 \left(1 - \frac{q_0^2 a^2}{8}\right)^2,$$

где $n_q = 1/(e^{\hbar\omega_0/kT} - 1)$, а q_0 определяется соотношением

$$\hbar\omega(q_0) = \hbar\sqrt{\frac{\alpha}{\rho}}q_0^{3/2} = E_{10}^{(1)} + W_{10} - E_{02}^{(1)} - W_{02} = \frac{3}{4}\frac{\hbar^2}{m_e d^2} + \frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi\alpha},$$

откуда

$$qa = \left(\frac{1}{\hbar}\sqrt{\frac{\rho}{\alpha}}\right)^{2/3} \left(\frac{\hbar^2 d^3}{mZe^2}\right)^{1/4} \left[\frac{3\hbar^2}{4md^2} + \frac{(eE_{\perp})^2}{8\pi\alpha}\right]^{2/3}.$$

Видно, что ширина очень сильно зависит от qa , то есть от глубины d , от диэлектрической проницаемости подложки ϵ_s и от номера уровня. При $d = 1000\text{Å}$, $F = 3000\text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$, $Z_{ef} = 1$, $T = 0.5\text{ К}$ получаем $qa = 5.2$ и $\Gamma_2^R = 0.003\text{ К}$. Если уменьшить d в два раза, то $qa = 7$ и $\Gamma_2^R \sim 10^{-5}\text{ К}$. Ширина второго уровня имеет немонокотную зависимость от прижимающего поля. Она имеет пологий максимум при $E_{\perp} \approx 1500\text{ В}\cdot\text{см}^{-1}$, возникающий из-за конкуренции множителя $(E_{\perp} + E_{ef})^2$ и экспоненциальной зависимости ширины от $q_0 a$, куда прижимающее поле входит благодаря деформационным поправкам. При $d = 1000\text{Å}$ в точке максимума $\Gamma \approx 0.005\text{ К}$. Деформация поверхности существенно сказалась на ширине второго уровня. Это связано еще с тем, что расстояние между его подуровнями невелико. Для третьего уровня начальное расщепление в 11 раз больше, поэтому его ширина должна быть очень малой и меньше зависеть от деформационных эффектов.

При низких температурах вклад рассеяния на атомах экспоненциально мал и единственной причиной уширения уровней остается взаимодействие с риплонами. Сильная зависимость риплонной ширины от внешних параметров и от номера уровня является отличительной чертой электрона в связанном состоянии. Малость ширины уровней при $T < 0.6\text{ К}$ позволяет провести красивый спектроскопический эксперимент, аналогичный [7], но для связанных состояний.

Я выражаю признательность А.М.Дюгаеву и В.Б.Шикину за полезное обсуждение.

-
1. В.Б.Шикин, Ю.П.Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, М.: Наука, 1989.
 2. Ю.З.Ковдря, Ф.Ф.Менде, Б.А.Николаенко, *ФНТ* **11**, 1129 (1984).
 3. Yu.P.Monarkha and Yu.Z.Kovdrya, *ФНТ* **8**(2), 215 (1982).
 4. V.Vinter, *Phys. Rev. B* **26**, 6808 (1982).
 5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, М.: Наука, 1989.
 6. В.Б.Шикин, Ю.П.Монарха, *ЖЭТФ* **65**, 751 (1973).
 7. C.C.Grimes, T.R.Brown, Michael L.Burns, and C.L.Zipfel, *Phys. Rev. B* **13**, 140 (1976).
 8. Ts.Ando, *J. Physical Society of Jap.* **44**, 765 (1978).