

Температурная зависимость спектра электронов, левитирующих над твердым водородом

П. Д. Григорьев⁺, А. М. Дюгаев⁺, Е. В. Лебедева^{∇1)}

⁺ Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН, 142432 Черногловка, Московская обл., Россия

* Max-Planck-Institut for the Physics of Complex Systems, Dresden D-01187 Germany

[∇] Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черногловка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 6 декабря 2007 г.

После переработки 13 декабря 2007 г.

На основе опытных данных [1–3] и простой модели конденсированного водорода H_2 предложена теория фоторезонансных переходов для электронов, локализованных над поверхностью твердого H_2 . Дано новое объяснение обнаруженной в [1–3] сильной зависимости частот переходов ν от давления паров водорода. В отличие от представлений работ [2, 3, 15], основанных на выделении эффектов квантового преломления электронов на атомах пара H_2 , температурная зависимость частот $\nu = \nu(T)$ связывается нами с неоднородностью пара H_2 . На опыте имеет место неаналитическая зависимость ν от плотности пара n_v : $\nu(n_v) - \nu(0) \sim n_v^\gamma \sim e^{-\Delta/T}$; $\gamma \cong 0.56$. Энергия активации Δ отвечает “неполному испарению” твердого водорода [6, 7]. Параметр Δ меньше энергии “полного испарения” твердого H_2 , равной 92.6 К.

PACS: 67.55.Ig

1. В работах [1–3] наблюдалось резонансное поглощение света при переходах в спектре электронов, левитирующих над поверхностью твердого водорода H_2 . Главным результатом [1–3] было обнаружение сильной зависимости частот переходов от давления паров H_2 , что объяснялось эффектом квантового преломления электронов в газе водорода. Для сравнения теории и опыта принималось значение длины рассеяния электрона на молекуле водорода $a_0 = -1.4 \text{ \AA}$, которое по знаку отличается от общепринятой величины $a_0 = 0.67 \text{ \AA}$ [4]. При этом возникла парадоксальная ситуация, когда электрон притягивается молекулами газообразного и отталкивается молекулами твердого и жидкого H_2 .

Для объяснения указанного парадокса в [1–3] предполагалась сильная энергетическая зависимость сечения рассеяния электрона на молекуле H_2 , что и приводит к изменению знака длины рассеяния a_0 в пределе нулевой энергии электрона. Теория эффекта квантового преломления была построена в 1934 г. [5] для локализованных электронов, находящихся в газовой среде, эффект существует для оптических переходов между состояниями с сильно различными объемами V_{ne} . Требуется, чтобы плотность газа n_v была настолько мала, чтобы для основного состояния выполнялось условие $V_{1e}n_v \ll 1$, а объем возбужденного состояния был настолько велик, что $V_{ne}n_v \gg 1$. При

этом энергии таких возбужденных состояний сдвигаются на одну и ту же величину

$$\Delta E_n = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_0 n_v, \quad (1)$$

m – масса электрона, \hbar – постоянная Планка. Энергия же основного состояния E_1 в указанном пределе малой плотности газа n_v не сдвигается. В [5] теория строилась для полностью локализованных атомных состояний, когда объем волновой функции электрона $V_{ne} \sim r_B n^6$, где r_B – боровский радиус, n – номер возбужденного состояния. Поэтому неравенство $V_{ne}n_v \gg 1$ всегда выполняется для больших значений n .

Для электрона, левитирующего над поверхностью конденсированной среды, волновая функция $\Psi(z, \rho)$ имеет вид

$$\Psi(z, \rho) = \varphi_n(z) e^{i\rho\rho}. \quad (2)$$

Независимо от высоты левитации z_n

$$\bar{z}_n = \int \varphi_n^2 z dz, \quad (3)$$

электрон делокализован в плоскости ρ , разделяющей конденсированную среду и ее пар. Поэтому электронный объем $V_{ne} \equiv \infty$ для всех состояний n (2), (3). При этом в приближении однородного распределения пара $n_v \neq n_v(z)$ весь электронный спектр сдвигается на одну и ту же величину (1). Такой сдвиг в

¹⁾ e-mail: lebedeva@issp.ac.ru

опытах по фоторезонансу левитирующих электронов не заметен.

2. В предлагаемой работе мы даем новое объяснение опытных данных [1–3]. Сильная зависимость частот переходов для электронов, локализованных над твердым водородом, связывается с неоднородностью пара H_2 , то есть с зависимостью n_v от z . Этот эффект рассматривался в 1924 г. [6, 7] при построении теории испарения твердых тел и жидкостей. Согласно этой теории, существует два типа испарения. Первый тип – “полное испарение”, когда атом конденсированной среды способен удалиться на большие расстояния в газовой фазе. Для этого требуется энергия активации, равная $|\mu|$, где μ – химический потенциал кристалла или жидкости. Значение μ определяет температурную зависимость плотности пара $n_v = n_v(T)$:

$$n_v = \left(\frac{MT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{|\mu|}{T}\right), \quad (4)$$

где M – масса атома или молекулы.

Второй тип – “неполного испарения”, согласно [6, 7], требует энергии активации Δ , меньшей, чем $|\mu|$. Он отвечает не уходу атома в газовую фазу, а его локализации или левитации на поверхности или над поверхностью конденсированной среды. Отметим, что такие левитирующие атомы дают определяющий вклад в температурную зависимость поверхностного натяжения жидкого гелия [8, 9] при низких температурах.

Для определения значений двух энергий активации $|\mu|$ и Δ , отвечающих двум типам испарения [6, 7], обратимся к опытным данным для конденсированного H_2 . Параметр $\mu = \mu(T)$ определяется из (4) на основе уравнения состояния идеального газа

$$p(T) = n_v(T)T \quad (5)$$

и справочных данных для давления пара H_2 : $p = p(T)$ [10]. График зависимости $\mu = \mu(T)$ приведен на рис.1. Ниже тройной точки, когда пар находится в равновесии с твердым H_2 , химический потенциал не зависит от температуры с точностью 10^{-2} при изменении давления $p(T)$ на три порядка: $\mu = -92.6 \text{ К} = \mu(T = T_0)$. Выше тройной точки T_0 пар находится в равновесии с жидким водородом, а химический потенциал μ квадратично зависит от T (рис.1):

$$\mu = \mu_0 - T^2/T_\mu, \quad \mu_0 = -85.4 \text{ К}, \quad T_\mu = 27.2 \text{ К}. \quad (6)$$

Зависимость (6) имеет место с точностью 10^{-2} в области $14 \text{ К} < T < 30 \text{ К}$, где давление $p = p(T)$ меняет-

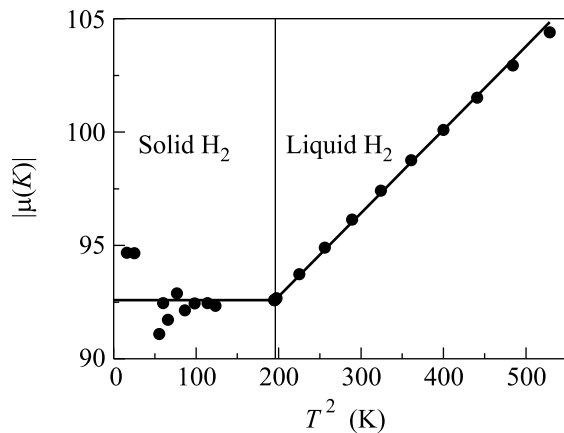


Рис.1. Зависимость энергии активации $|\mu|$ от квадрата температуры T для конденсированного H_2 . Параметр μ определен на основе (4), (5) и справочных данных [10] для температурной зависимости давления пара H_2 (точки). Область $T < T_0 = 14 \text{ К}$ отвечает твердому, а $T > T_0$ жидкому H_2 . Линии соответствуют аппроксимации (6) для жидкой и $\mu = -92.6 \text{ К}$ для твердой фаз

ся на два порядка. Обсуждение квадратичной зависимости (6) выходит за рамки данной работы. Укажем только, что она имеет место и для жидкого гелия в температурной области, где применима теория квантовых невырожденных жидкостей. Два противоречащих друг другу варианта этой теории приведены в [11, 12].

Для определения второй энергии активации Δ достаточно опытных данных [1–3], где определена частотная зависимость ν_{12} от плотности пара n_v для перехода из первого (основного) во второе (возмущенное) состояния электронов, левитирующих над твердым H_2

$$\nu_{12} = \frac{E_2 - E_1}{2\pi\hbar}, \quad (7)$$

где E_1, E_2 – энергии первых двух электронных уровней. В [1–3] зависимость ν_{12} от n_v аппроксимировалась линейной функцией n_v :

$$\nu_{12}(n_v) = \nu_{12}(n_v = 0) + \frac{\hbar}{m} a_0 n_v. \quad (8)$$

Из (8) в [2] и было получено значение длины рассеяния $a_0 = -1.4 \text{ Å}$. Однако экспериментальные точки для $\nu_{12} = \nu_{12}(n_v)$, приведенные на графиках в [1–3], не укладываются на зависимость (8) как в области низких, так и в области высоких значений плотности пара n_v . При изменении плотности n_v в 30 раз

выполняется отличная от (8) неаналитическая зависимость ν_{12} от n_v , приведенная на рис.2:

$$\nu_{12}(n_v) = \nu_{12}(0) \left[1 - \lambda \left(\frac{n_v}{n_{v0}} \right)^\gamma \right], \quad (9)$$

где $\nu_{12}(0) = 3.24 \cdot 10^{12}$ Гц, $\lambda = 0.19$, $\gamma = 0.56$, а плотность пара n_v обезразмерена ее значением в тройной точке T_0 : $n_{v0} = n_v(T_0) = 3.8 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$. Сравнение (4) и (9) показывает, что температурная зависимость $\nu_{12} = \nu_{12}(T)$ определяется не энергией активации “полного испарения” $|\mu| = 92.6$ К, а другим,

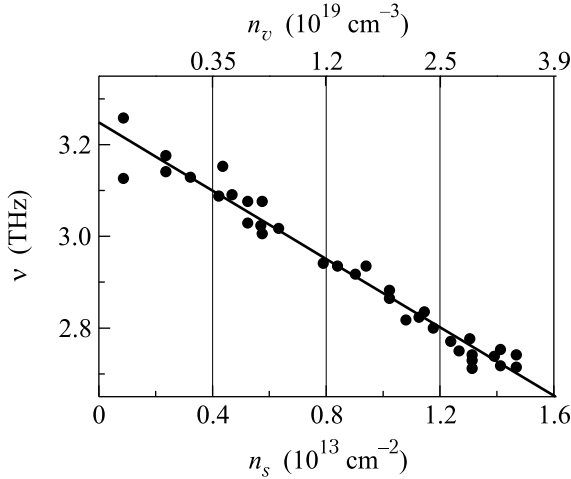


Рис.2. Зависимость частоты перехода ν_{12} от плотности пара n_v и поверхностной плотности n_s , построенная по опытными данным [2]. График отвечает формулам (9), (15): $\nu_{12}(n_v) - \nu_{12}(0) \sim n_v^\gamma \sim n_s$

меньшим значением $\Delta = |\mu|\gamma = 52$ К. Чтобы показать, что Δ и есть характеристика “неполного испарения”, и определить параметр γ в (9), рассмотрим простейшую модель конденсированного H_2 .

3. Это модель сплошной среды с плотностью n_{H_2} , заполняющей полупространство $z < 0$. Взаимодействие молекул пара при $z > 0$ и конденсированного H_2 при $z < 0$ аппроксимируем потенциалом

$$v(r) = 4\epsilon_0 \left[\left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_0}{r} \right)^6 \right], \quad (10)$$

где r – расстояние между частицами пара и твердого H_2 . Для H_2 приведем общепринятые значения параметров в (10): $\epsilon_0 = 37$ К, $\sigma_0 = 2.93$ Å. В приближении сплошной среды эффективный (поверхностный) потенциал $V(z)$ для молекулы пара можно получить, суммируя $v(r)$ из (10) для всех частиц полупространства $z < 0$:

$$V(z) = V_0 \left[\left(\frac{\sigma_{0*}}{z} \right)^9 - \left(\frac{\sigma_{0*}}{z} \right)^3 \right], \quad (11)$$

где

$$V_0 = 5\pi\epsilon_0 n_{H_2} \sigma_{0*}^3, \quad \sigma_{0*} = \sigma_0 (2/15)^{1/6}.$$

Для твердого H_2 : $n_{H_2} = 2.652 \cdot 10^{22}$ см $^{-3}$, $V_0 = 140$ К, $\sigma_{0*} = 2.09$ Å.

В классическом пределе зависимость плотности пара от z дается известным выражением [13]

$$n_v(z) = n_v \exp\left(-\frac{V(z)}{T}\right), \quad n_v = n_v(z = \infty). \quad (12)$$

Поверхностную (избыточную) плотность пара n_s естественно определить интегралом

$$\begin{aligned} n_s &= \int_0^\infty (n_v(z) - n_v) dz = \\ &= n_v \int_0^\infty \left(\exp\left(-\frac{V(z)}{T}\right) - 1 \right) dz. \end{aligned} \quad (13)$$

Интегрирование в (13) ограничено узкой областью вблизи $z_m = 2.51$ Å, где потенциал $V(z)$ имеет минимальное значение, $V_m = V(z_m) = -53.9$ К. Для всех $T < 14$ К с экспоненциальной точностью

$$n_s \sim \sigma_{0*} n_v \exp\left(\frac{|V_m|}{T}\right).$$

Численное интегрирование (13) с учетом (11) и (4) определяет зависимость поверхностной плотности n_s от плотности пара n_v :

$$\frac{n_s}{n_{s0}} = \left(\frac{n_v}{n_{v0}} \right)^\gamma, \quad (14)$$

$n_{s0} = 1.44 \cdot 10^{13}$ см $^{-2}$, $n_{v0} = 3.8 \cdot 10^{19}$ см $^{-3}$, $\gamma = 0.56$. График зависимости $\ln n_s$ от $\ln n_v$ приведен на рис.3. Параметры n_{s0} и n_{v0} дают значения n_s , n_v в тройной точке. Итак, основываясь только на анализе опытных данных [1–3] и простейшей модели конденсированного H_2 , мы определили параметр γ в (9) и показали, что частота перехода ν_{12} зависит линейно от поверхностной плотности n_s (9), (14):

$$\nu_{12}(n_s) = \nu_{12}(0) \left(1 - \lambda \frac{n_s}{n_{s0}} \right), \quad (15)$$

а линейная зависимость ν_{12} от плотности пара (8) не имеет места.

4. Более детальная теория рассматриваемых явлений, позволяющая определить параметр λ в (9), (15), основана на квантовании состояний пара $n_v(z)$. Однако знак λ можно определить на основе точного выражения, связывающего сдвиги электронных энергий ΔE_n с плотностью $n_v(z)$:

$$E_n = E_{n0} + \Delta E_n,$$

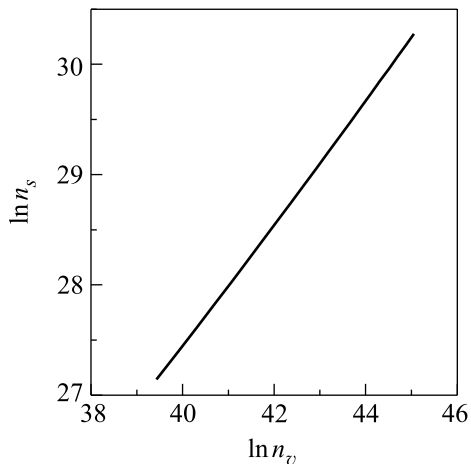


Рис. 3. Зависимость $\ln n_s$ от $\ln n_v$ демонстрирует связь поверхностной плотности n_s с плотностью пара n_v (14)

$$\Delta E_n = \frac{2\pi\hbar^2 a_0}{m} \int_0^\infty \varphi_{n0}^2(z) n_v(z) dz. \quad (16)$$

Энергия $E_n = E_{n0}$ и волновые функции $\varphi_{n0}(z)$ отвечают состояниям без учета взаимодействия электронов с молекулами пара. Функция $\varphi_{n0}(z)$ нормирована условием

$$\int_0^\infty \varphi_{n0}^2 dz = 1. \quad (17)$$

Поэтому разница энергий $E_n - E_1$ определяется интегрированием по области малых z , где плотность пара $n_v(z)$ имеет δ -образный максимум при $z = z_0 \approx 3 \text{ \AA}$:

$$E_n - E_1 = E_{n0} - E_{10} - \frac{2\pi\hbar^2 a_0}{m} \int_0^\infty (\varphi_1^2 - \varphi_n^2) (n_v(z) - n_v) dz. \quad (18)$$

Из (18) и (13), вынося функции φ_n^2 за знак интеграла в точке z_0 , приближенно получаем

$$E_n - E_1 = E_{n0} - E_{10} - \delta n_s, \quad (19)$$

$$\delta = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_0 [\varphi_1^2(z_0) - \varphi_n^2(z_0)].$$

Так как при малых z_0 $\varphi_n^2(z_0) \sim z_0^2/n^3$ [14], параметры δ , λ и a_0 (9), (19) имеют одинаковые знаки. Кроме того, значение δ с точностью до поправок $\sim 1/n^3$ не зависит от n .

Чтобы дать представление о значении параметра δ в (19), приведем зависимость $\varphi_n = \varphi_n(z)$ для первых двух электронных состояний [14]:

$$\varphi_1^2 = \frac{4z^2}{r_e^3} \exp(-2z/r_e),$$

$$\varphi_2^2 = \frac{z^2}{2r_e^3} \exp(-z/r_e) \left(1 - \frac{z}{2r_e}\right)^2. \quad (20)$$

Для твердого H_2 $r_e = 16.8 \text{ \AA}$ [2], для жидкого He_4 $r_e = 76 \text{ \AA}$ [14], для жидкого He_3 $r_e = 101 \text{ \AA}$ [14]. Из (19), (20) получаем

$$\delta = \frac{7\pi\hbar^2 a_0 z_0^2}{mr_e^3}. \quad (21)$$

Так как $r_e \gg z_0$, $r_e \gg a_0$, параметр δ (21) мал для всех указанных конденсированных сред. Сравнивая численные значения r_e для водорода и гелия, можно объяснить малость эффекта влияния взаимодействия электронов с атомами пара гелия [2, 3]. Чем меньше высота левитации электрона r_e , тем сильнее он взаимодействует с поверхностными атомами. Характер температурной зависимости частот перехода ν_{12} (7) определяется, в основном, сдвигом энергии основного состояния электрона E_1 (16). Для электронов, левитирующих над твердым водородом, этот сдвиг положителен, что связано с положительным знаком длины рассеяния a_0 [4].

Таким образом, мы построили теорию фоторезонансных переходов для электронов, локализованных на поверхности твердого H_2 при общепринятом значении длины рассеяния a_0 [4], что противоречит теории, изложенной в [2, 3, 15].

В заключение укажем на интересную возможность наблюдать рассмотренные эффекты и для электронов, левитирующих над жидким водородом. Для частот переходов мы ожидаем зависимость (9): $\nu_{12} = \nu_{12}(n_v)$ с перенормированными значениями параметров $\nu_{12}(0)$, λ и γ .

Авторы благодарны Л.П. Межову-Деглину за обсуждение результатов.

Работа поддержана грантами Российского фонда фундаментальных исследований # 06-02-16551 и # 06-02-16223.

1. В. В. Завьялов, И. И. Смольянинов, Письма в ЖЭТФ **44**, 142 (1986).
2. В. В. Завьялов, И. И. Смольянинов, ЖЭТФ **92**, 339 (1987).
3. В. В. Завьялов, И. И. Смольянинов, ЖЭТФ **94**, 307 (1988).
4. R. W. Crompton and M. A. Morrison, Phys. Rev. A **94**, 3695 (1982).
5. E. Fermi, Nuovo Cim. **11**, 157 (1934).
6. J. I. Frenkel, Z. Phys. **26**, 37 (1924).
7. Я. И. Френкель, Кинетическая теория жидкостей, М.: Изд. АН СССР, 1945.

8. А. Ф. Андреев, *ЖЭТФ* **50**, 1415 (1966).
9. А. М. Дюгаев, П. Д. Григорьев, *Письма в ЖЭТФ* **78**, 935 (2003).
10. Б. И. Веркин, В. П. Манжелей, В. Н. Григорьев и др., *Свойства конденсированных фаз водорода и кислорода, справочник*, Киев: Наукова думка, 1984.
11. А. Ф. Андреев, *Письма в ЖЭТФ* **28**, 603 (1978).
12. А. М. Dyugaev, *J. Low Temp. Phys.* **78**, 79 (1990).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Статистическая физика*, М.: Наука, 1976.
14. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, М.: Наука, 1989.
15. В. Б. Шикин, С. Н. Назин, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 752 (2005).