

01

Энергия электрона вблизи поверхности металла в электрическом и магнитном полях

© П.А. Головинский^{1,2}, М.А. Преображенский¹

¹ Воронежский государственный архитектурно-строительный университет

² Московский физико-технический институт (государственный университет), Долгопрудный

E-mail: golovinski@bk.ru

Поступило в Редакцию 1 декабря 2014 г.

Получены точные волновые функции электрона, связанного потенциалом изображения, в перпендикулярном поверхности металла магнитном поле. В первом порядке по взаимодействию с внешним электрическим полем рассчитаны поправки к энергии электрона. Проанализирована возможность экспериментального измерения локального электрического поля по сдвигу уровней.

Системы пониженной размерности (двумерные, одномерные и нульмерные) обладают рядом необычных свойств, что в значительной мере определяет их роль в исследовании и проектировании наноразмерных устройств [1]. В частности, электрон у поверхности металла взаимодействует с индуцируемым на поверхности поляризационным зарядом, притяжение к которому приводит к появлению локализованных состояний. Вдали от поверхности в вакууме этот потенциал хорошо аппроксимируется классическим дальнедействующим потенциалом [2]. Электрон у поверхности металла находится в поле своего изображения [3–5], взаимодействие с которым асимптотически описывается одномерным кулоновским оператором энергии притяжения электрона к поверхности металла $V = -1/4z$, определяющим локализацию электрона вблизи поверхности [6] (используется атомная система единиц: $\hbar = e = m = 1$). Такая модель соответствует „одномерному атому“ с эффективным зарядом $Z = 1/4$ и водородоподобными состояниями электрона, энергии которых $E_\nu = -1/32(\nu + a)^2$ определяются квантовым числом ν и величиной квантового дефекта a , слабо зависящей от ν [3,7]. Эти теоретические представления [8–10] подтверждаются спектроскопиче-

скими наблюдениями, например, двухфотонной резонансной эмиссии электронов из металла [11]. Последовательное описание взаимодействия электрона с поверхностными плазмонами, позволяющее учесть временную дисперсию, возможно в рамках многочастичной теории. Как показано в работе [2], многочастичные эффекты вносят вклад в ширины нижних состояний с $\nu \leq 3$. Ридберговские состояния с $\nu > 3$ адекватно описываются в одночастичном приближении.

В данной работе рассматривается отклик электрона, связанного в потенциале изображения, на действие электрического и магнитного полей и проанализирована возможность использования этого эффекта для спектроскопического измерения электрического поля вблизи поверхности металла.

Нерелятивистский гамильтониан электрона в электромагнитном поле следующим образом выражается через операторы импульса $\hat{\mathbf{p}}$, собственного магнитного момента $\hat{\boldsymbol{\mu}}$, векторный \mathbf{A} и скалярный φ потенциалы электрического поля и напряженность магнитного поля \mathbf{H} [12]:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{\mathbf{A}}{c} \right)^2 - \hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{H} - \varphi. \quad (1)$$

Рассмотрим поведение электрона в поле потенциала изображения в однородных электрическом и магнитном полях, направленных перпендикулярно границе металла. В этом случае скалярный потенциал зависит только от координаты и связан с напряженностью внешнего электрического поля F соотношением $\varphi = 1/4z + Fz$. Векторный потенциал можно выбрать в виде $\mathbf{A} = \{-Hy, 0, 0\}$. Стационарное уравнение Шредингера тогда принимает вид

$$\left\{ (\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 + 2\hat{p}_x Hy/c + H^2 y^2/c^2)/2 - Fz - 1/4z - \sigma H/c - E \right\} \psi(x, y, z) = 0. \quad (2)$$

Здесь учтено, что оператор $\hat{\boldsymbol{\mu}} \mathbf{H}$ коммутирует с гамильтонианом (1) и, следовательно, электрон имеет определенное значение проекции спина $\sigma = \pm 1/2$.

Гамильтониан уравнения (2) аддитивен по декартовым координатам, вследствие чего переменные в его решении полностью разделяются. Кроме того, поскольку гамильтониан уравнения (2) не содержит переменной x , он коммутирует с компонентой оператора импульса \hat{p}_x . Соответствующая компонента волновой функции совпадает с собственной

функцией оператора \hat{p}_x и при нормировке на δ -функцию описывается плоской волной $\exp(ip_x x)/\sqrt{2\pi}$. С учетом этого волновая функция электрона может быть представлена в виде

$$\psi(x, y, z) = \exp(ip_x x)\chi(y)\varphi_z(z)/\sqrt{2\pi}. \quad (3)$$

Подставляя волновую функцию (3) в уравнение (2), получим независимые уравнения на y - и z -компоненты волновой функции:

$$\{d^2/dy^2 - H^2(y + cp_x/H)^2/c^2 + p_x^2 + 2E_y + 2\sigma H/c\}\chi(y) = 0, \quad (4)$$

$$\{d^2/dz^2 + 2(Fz + 1/4z + E_z)\}\varphi_z(z) = 0. \quad (5)$$

Полная энергия электрона имеет вид

$$E = p_x^2/2 + E_y + E_z. \quad (6)$$

Замена переменной $Y = y + cp_x/H$ и введение параметров

$$E_m = p_x^2/2 + E_y + \sigma H/c, \quad \omega = H/c \quad (7)$$

позволяет свести уравнение (4) к уравнению Шредингера для гармонического осциллятора [12]

$$(d^2/dY^2 + 2E_m - \omega^2 Y^2)\chi(Y) = 0. \quad (8)$$

Компонента волновой функции $\chi(Y)$ следующим образом выражается через полиномы Эрмита [12,13]:

$$\chi(Y) = (H/\pi c)^{1/4} (2^n m!)^{-1/2} \exp(-HY^2/2c) H_m(Y\sqrt{H/c}) \quad (9)$$

при эквидистантном дискретном спектре

$$E_m = (m + 1/2)\omega; \quad m = 1, 2, 3, \dots, \infty. \quad (10)$$

В соответствии с соотношениями (7) и (9), составляющая энергии E_y линейна по напряженности магнитного поля

$$E_y = (m - \sigma + 1/2)H/c - p_x^2/2. \quad (11)$$

Таким образом, в поле потенциала изображения и магнитном поле, перпендикулярном поверхности металла наблюдается линейный эффект Зеемана.

Величина E_z определяется из уравнения (5), решение которого найдем в первом порядке теории возмущений по взаимодействию электрона с внешним электростатическим полем. В отсутствие внешнего электрического поля $\varphi_\nu(z)$ удовлетворяет уравнению

$$(d^2/dz^2 + 1/2z + 2E_\nu^0)\varphi_\nu(z) = 0. \quad (12)$$

Его решение $\varphi_\nu(z) = f_\nu(z)/z$, где $f_\nu(z)$ совпадает с радиальной частью волновой функции s-состояния водородоподобного атома с зарядом $Z = 1/4$ [12]. При отрицательных значениях энергии $E_\nu < 0$ нормированные на единицу решения уравнения (12) выражаются через вырожденную гипергеометрическую функцию $\Phi(1 - \nu, 2, 2z/\nu)$ [13]

$$\varphi_\nu(z) = 2\nu^{-3/2}z \exp(-z/\nu)\Phi(1 - \nu, 2, 2z/\nu). \quad (13)$$

Квантовое число $\nu = 1/\sqrt{-2E_\nu^0}$ принимает целые положительные значения.

Дипольный момент электрона $z_\nu = \langle \varphi_\nu(z)|z|\varphi_\nu(z) \rangle$ в поле потенциала изображения вследствие отсутствия зеркальной симметрии отличен от нуля. Поэтому, в отличие от движения в трехмерном кулоновском потенциале, сдвиг уровней, определяемый выражением

$$\Delta E_z = Fz_\nu, \quad (14)$$

появляется уже в первом порядке теории возмущений по взаимодействию электрона с внешним электрическим полем [14].

Расчет сечений однофотонных переходов в кулоновском потенциале между состояниями с различными энергиями E_i и E_f в дипольном приближении обычно базируется на использовании при расчете матричных элементов интегральных соотношений для вырожденных гипергеометрических функций [15], а дипольный момент состояния получается предельным переходом $E_i \rightarrow E_f$. Для статических полей можно сформулировать алгоритм непосредственного расчета дипольного момента дискретного состояния, основанный на сведении выражения для матричного элемента z_ν в выражении (14) к суперпозиции интегралов Эйлера [13]. С учетом нормировки (13) оно принимает вид

$$z_\nu = \frac{3}{2} \left\{ 1 + (\nu - 1)! \sum_{s=0}^{\min[1, \nu-2]} \frac{(-3-s)(-2-s)\dots(-2+s)}{(\nu-2-s)![(s+1)!]^2(s+2)!} \right\}. \quad (15)$$

Сумма в выражении (15) для состояний с квантовым числом $\nu > 2$ содержит 2 слагаемых и после вычисления приводит к соотношению

$$z_\nu = 3\nu^2/2, \quad (16)$$

формально совпадающему со средним значением расстояния r в s -состоянии трехмерного атома водорода. Оно справедливо также для основного и первого возбужденного состояния. Учитывая связь квантового числа ν с невозмущенной энергией E_ν^0 , а также уравнение (16), z -компоненту энергии связанного состояния в электростатическом поле можно представить в виде

$$E_z = -1/2\nu^2 + 3F\nu^2/2. \quad (17)$$

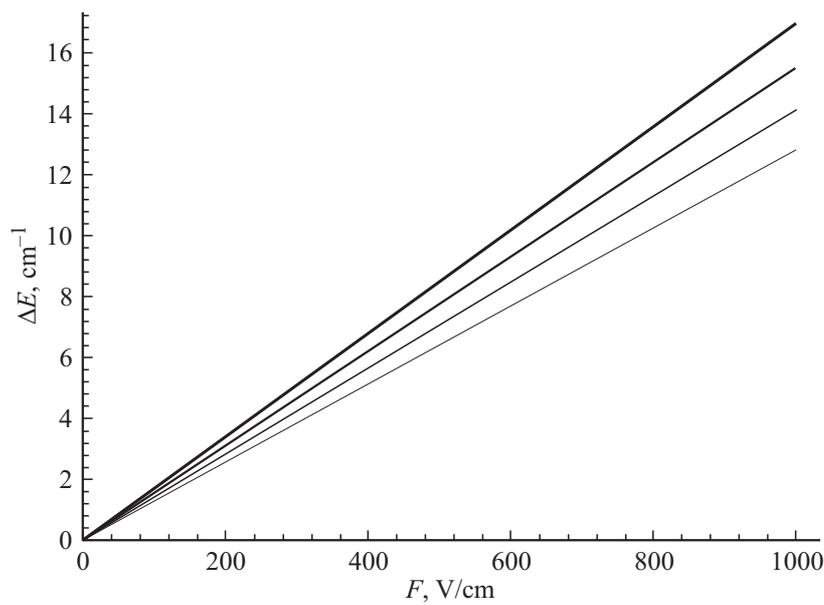
Условие применимости первого порядка теории возмущений определяется малостью относительного сдвига энергии соседних состояний по сравнению с расстоянием между ними, что приводит к условию $F \ll (2\nu + 1)/(3\nu^4(\nu + 1)^2)$. Для уровней $\nu \gg 1$ оно упрощается и принимает вид $F \ll \nu^{-5}$. Сужение области применимости теории возмущений при приближении к границе ионизации объясняется увеличением протяженности электронного облака.

Подставляя y -составляющую (11) и z -составляющую энергии (17) в выражение (6) для полной энергии электрона, получим

$$E(m, \nu) = (m - \sigma + 1/2)H/c - 1/2\nu^2 + 3F\nu^2/2. \quad (18)$$

Поскольку энергия (18) не зависит от компоненты импульса p_x , состояния электрона, описываемые волновой функцией (3), обладают бесконечным вырождением, характерным для уровней Ландау. График зависимости сдвига полной энергии от величины электрического поля для ряда высоковозбужденных состояний электрона в поле потенциала изображения показан на рисунке. Приведенные зависимости наглядно демонстрируют линейный рост расстояний между уровнями с увеличением напряженности электрического поля.

Как следует из уравнения (18), линейный статический эффект Штарка вносит вклад в энергии всех состояний электрона, связанных одномерным кулоновским взаимодействием. В противоположность этому в трехмерном кулоновском потенциале основное состояние не сдвигается в однородном электрическом поле. Это отличие определяется разной



Зависимость сдвига энергии ΔE состояний электрона с квантовыми числами (снизу вверх) $\nu = 20, 21, 22, 23$, связанного потенциалом изображения, от напряженности электрического поля.

физической причиной сдвига энергии в трехмерном потенциале линейный по полю сдвиг обуславливается взаимодействием вырожденных уровней, а в одномерном случае — зеркальной асимметрией состояний.

В соответствии с выражением (18) изменение энергии перехода между состояниями с одинаковыми магнитными квантовыми числами m определяется напряженностью электрического поля и квантовыми числами ν_i и ν_f уровней, между которыми происходит радиационный переход

$$\Delta E = 3F(\nu_i^2 - \nu_f^2)/2. \quad (19)$$

Погрешность определения напряженности электрического поля, достигнутая спектроскопическими измерениями ридберговских состояний с $\nu = 90$ с высоким разрешением в ультрахолодном газе атомов цезия составляет 1 mV/cm [16]. Разрешение определяется шириной линии высокочастотного резонанса, составляющей $\delta E = 20\text{--}60 \text{ kHz}$

($3 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^{-1}$). Для ридберговских состояний в потенциале изображения изменение энергии перехода (в единицах cm^{-1}) между уровнями, квантовые числа которых отличаются на k , равно $\Delta E_k \approx 6.42 \cdot 10^{-5} \nu k F$ (здесь напряженность электрического поля выражена в V/cm и считается, что $k \ll \nu$). Минимальная напряженность электрического поля F_{\min} , измеряемого спектроскопическим методом в поле потенциала изображения, ограничиваемая условием $\Delta E_k \geq \delta E$, равна $F_{\min} \geq 5 \cdot 10^{-2} / \nu k$. Таким образом, в поле потенциала изображения разрешение в 1 mV/cm может быть достигнуто на переходе между соседними уровнями с квантовыми числами $\nu \sim 50$ и увеличено при росте энергии кванта перехода. Кроме этого, спектроскопические измерения переходов в поле потенциала изображения упрощаются по сравнению со случаем ридберговских состояний атомов за счет более простой энергетической структуры связанных состояний, в которой отсутствуют близкие квазивырожденные уровни. В отличие от электрического поля точность спектроскопического измерения магнитного поля не увеличивается с ростом квантовых чисел дискретных состояний. Однако наличие магнитного поля облегчает удержание электронов, позволяя локализовать их состояния в определенной области вблизи поверхности металла.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 13-07-00270) и ГЗ Минобрнауки РФ № 2014/19-2881.

Список литературы

- [1] Научные основы нанотехнологий и новые приборы / Под ред. Р. Келсалла, А. Хэмли, М. Геогенана. Долгопрудный: Изд. дом „Интеллект“, 2011. 527 с.
- [2] Chulkov E.V., Sarria I., Silkin V.M. // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 80. P. 4947.
- [3] Echenique P.M., Uranga M.E. // Surface Science. 1991. V. 247. P. 125.
- [4] Echenique P.M., Berndt R., Chulkov E.V., Fauster T., Goldmann A., Höfer U. // Surface Science Reports. 2004. V. 52. P. 219.
- [5] Еремеев С.В., Циркин С.С., Чулков Е.В. // ФТТ. 2010. V. 52. P. 1644.
- [6] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М.: Наука, 2002. 656 с.
- [7] Chulkov E.V., Silkin V.M., Echenique P.M. // Surface Science. 1999. V. 437. P. 330.
- [8] Höfer U., Shumay I.L., Reub Ch. et al. // Science. 1997. V. 277. P. 1480.
- [9] Echenique P.M., Pendry J. B. // Prog. Surf. Sci. 1990. V. 32. P. 111–172.

- [10] Dynamics at solid state surfaces and interfaces / Ed. by U. Bovenseipen, H. Petek, M. Wolf. Weinheim: Wiley-VCH, 2010. 619 p.
- [11] *Shutay I.L., Höfer U., Reub Ch.* et al. // Phys. Rev. B. 1998. V. 58. N 20. P. 13 974.
- [12] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Наука, 1974. С. 24.
- [13] *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. Гипергеометрическая функция, функции Лежандра. М.: Наука, 1973. 294 с.
- [14] *Собельман И.И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963. 640 с.
- [15] *Bethe H.A., Salpeter E.E.* Quantum mechanics of one- and two-electron atoms. NY: Dover Publications, 2008. 369 p.
- [16] *Sabmannshausen H., Merkt F., Deigmayr J.* // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. P. 032 519.