

# Температурная зависимость спектра электронов, левитирующих над твердым водородом

П. Д. Григорьев<sup>+</sup>, А. М. Дюгаев<sup>+</sup>, Е. В. Лебедева<sup>∇1)</sup>

<sup>+</sup> 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

<sup>∇</sup> 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  $\nu$  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  $\nu$  от плотности пара  $n_v$ :  $\nu(n_v) - \nu(0) \sim n_v^\gamma \sim e^{-\Delta/T}$ ;  $\gamma \cong 0.56$ . Энергия активации  $\Delta$  отвечает “неполному испарению” твердого водорода [6, 7]. Параметр  $\Delta$  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  $\rho$ , 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

<sup>1)</sup> 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  $\mu$  – химический потенциал кристалла или жидкости. Значение  $\mu$  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  $\Delta$ , 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  $\Delta$ , 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  $\mu$  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-

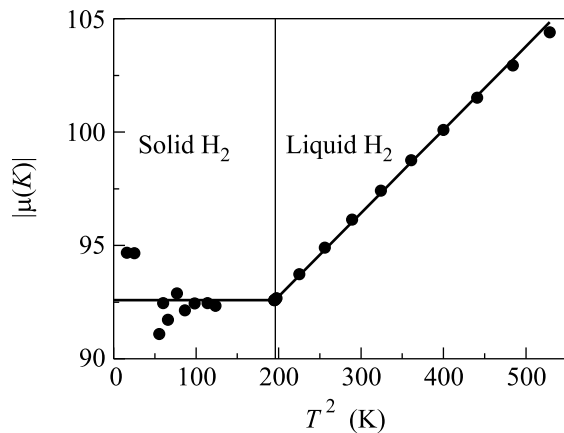


Рис.1. Зависимость энергии активации  $|\mu|$  от квадрата температуры  $T$  для конденсированного  $H_2$ . Параметр  $\mu$  определен на основе (4), (5) и справочных данных [10] для температурной зависимости давления пара  $H_2$  (точки). Область  $T < T_0 = 14 \text{ К}$  отвечает твердому, а  $T > T_0$  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  $\Delta$  достаточно опытных данных [1–3], где определена частотная зависимость  $\nu_{12}$  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  $\nu_{12}$  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  $\nu_{12}$  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,

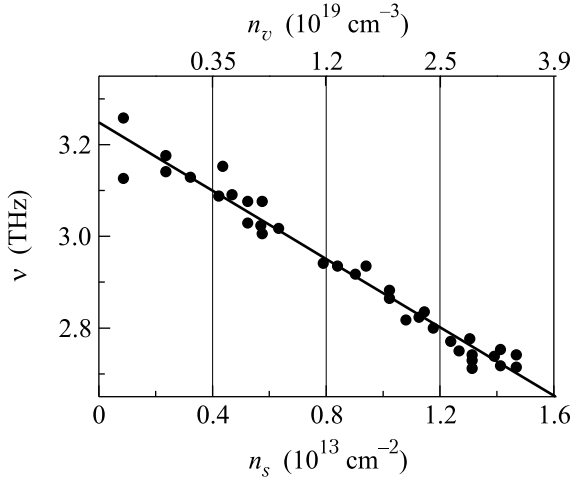


Рис.2. Зависимость частоты перехода  $\nu_{12}$  от плотности пара  $n_v$  и поверхностной плотности  $n_s$ , построенная по опытным данным [2]. График отвечает формулам (9), (15):  $\nu_{12}(n_v) - \nu_{12}(0) \sim n_v^\gamma \sim n_s$

меньшим значением  $\Delta = |\mu|\gamma = 52$  К. Чтобы показать, что  $\Delta$  и есть характеристика “неполного испарения”, и определить параметр  $\gamma$  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  $\gamma$  в (9) и показали, что частота перехода  $\nu_{12}$  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  $\nu_{12}$  от плотности пара (8) не имеет места.

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

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

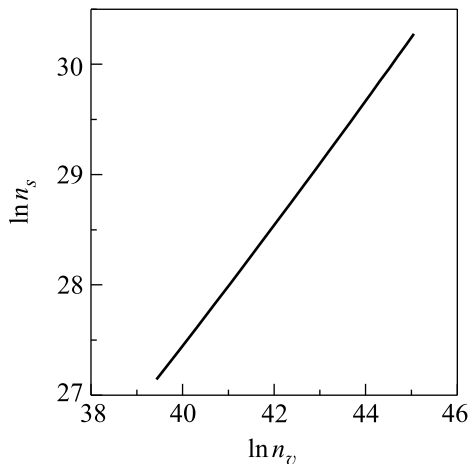


Рис. 3. Зависимость  $\ln n_s$  от  $\ln n_v$  демонстрирует связь поверхностной плотности  $n_s$  с плотностью пара  $n_v$  (14)

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

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  $\delta$ -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  $\varphi_n^2$  за знак интеграла в точке  $z_0$ , приближенно получаем

$$E_n - E_1 = E_{n0} - E_{10} - \delta n_s,$$

$$\delta = \frac{2\pi\hbar^2}{m} a_0 [\varphi_1^2(z_0) - \varphi_n^2(z_0)]. \quad (19)$$

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

Чтобы дать представление о значении параметра  $\delta$  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  $\text{H}_2$   $r_e = 16.8 \text{ \AA}$  [2], для жидкого  $\text{He}_4$   $r_e = 76 \text{ \AA}$  [14], для жидкого  $\text{He}_3$   $r_e = 101 \text{ \AA}$  [14]. Из (19), (20) получаем

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

Так как  $r_e \gg z_0$ ,  $r_e \gg a_0$ , параметр  $\delta$  (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  $\nu_{12}$  (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  $\text{H}_2$  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  $\nu_{12}(0)$ ,  $\lambda$  и  $\gamma$ .

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).