

Взаимодействие отрицательных ионов с поверхностью инертных жидкостей

А. М. Дюгаев, П. Д. Григорьев, Е.В. Лебедева

Институт Теоретической Физики им. Л.Д. Ландау РАН

Институт Физики твердого тела РАН (Черноголовка)

Письма в ЖЭТФ, 89(3), 165-169 (2009)

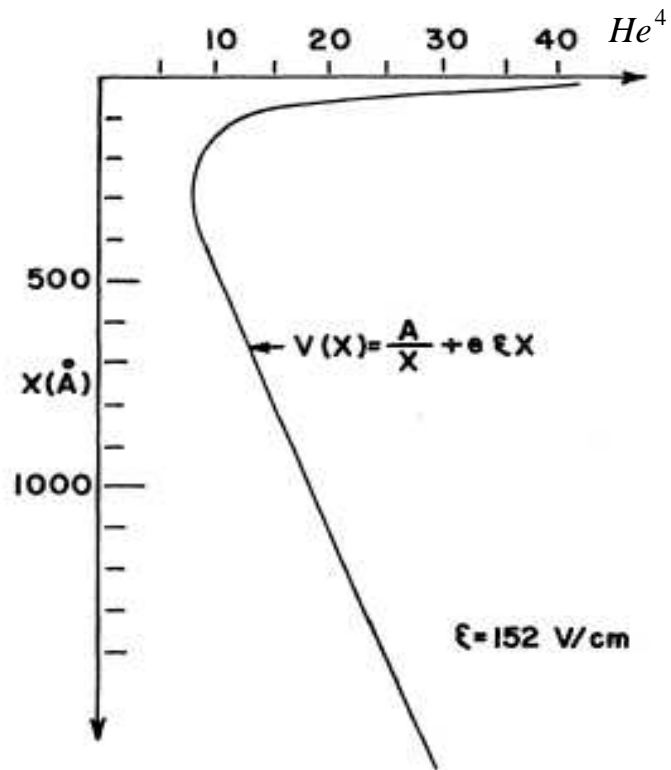
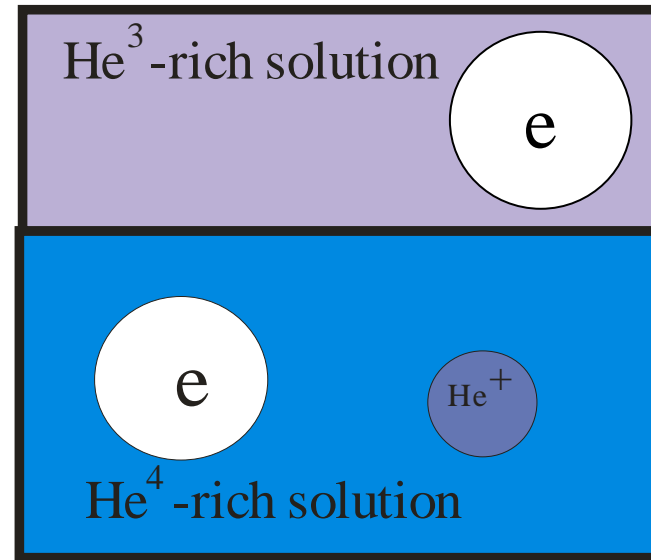
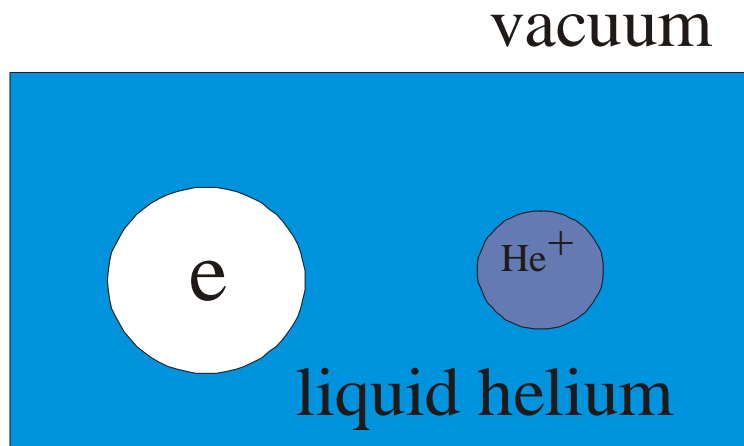
Transmission of the electrons through the liquid-vapor interface

Инертные жидкости – He^4, He^3, Ne

Температуры: 1-2 К

Граница расслоения насыщенных растворов He^4, He^3

Температуры – ниже 0.867 К



He^4	$R=17 \text{ \AA}$, $N=449$
He^3	$R=22.5 \text{ \AA}$, $N=780$
Ne	$R=10 \text{ \AA}$, $N=115$

$$V(z) = \frac{A}{z} + eEz$$

$$A = \frac{(\epsilon - 1)e^2}{4\epsilon(\epsilon + 1)} \quad A = \frac{(\epsilon_3 - \epsilon_4)e^2}{4(\epsilon_3 + \epsilon_4)}$$

Ранние работы: 70-е годы

M.Kuchnir, Pat R. Roach, and J.B. Petterson, JLTP, **3**, 183 (1970).

L. Bruschi, B. Maraviglia, and F. E. Moss, PRL, **17**, 682 (1966).

W. Schoepe, and G. W. Rayfield, Phys. Rev. A, **7**, 2111 (1973).

Milton W. Cole, and James R. Klein, JLTP, **36**, 331 (1979).

Заряженные комплексы – пробные частицы для изучения свойств квантовых жидкостей.

Новые работы 1990-2003: капли He^4

$N = 10^5 - 10^7$ атомов гелия, размеры капли: 100-500 Å

Сверхтекучесть в системах конечной геометрии.

Нерешенные проблемы:

1. Высота потенциального барьера не определена теоретически.
2. Рассчитанное и опытное времена жизни электронного пузырька отличаются на 3 порядка.

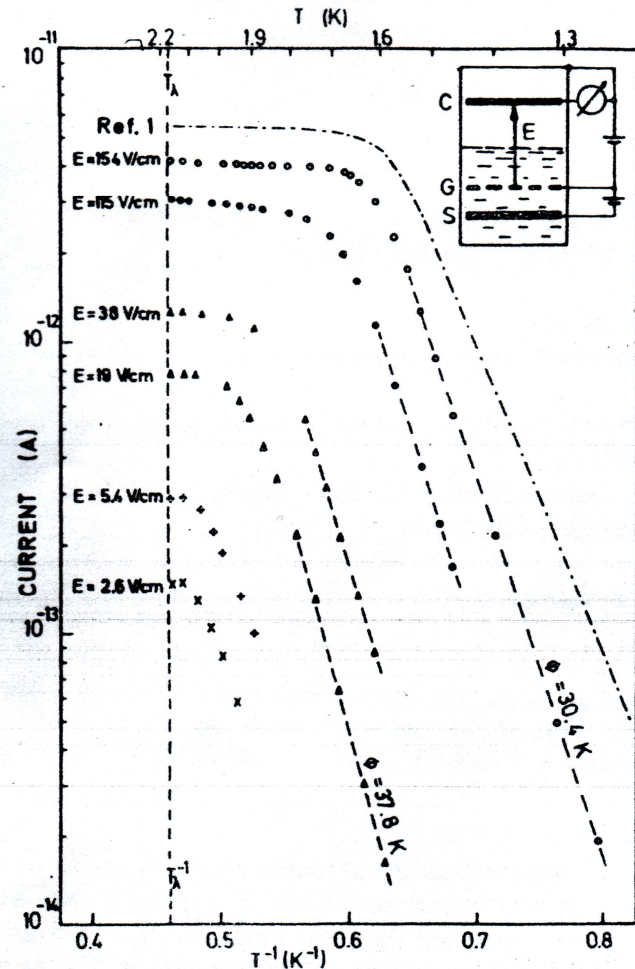
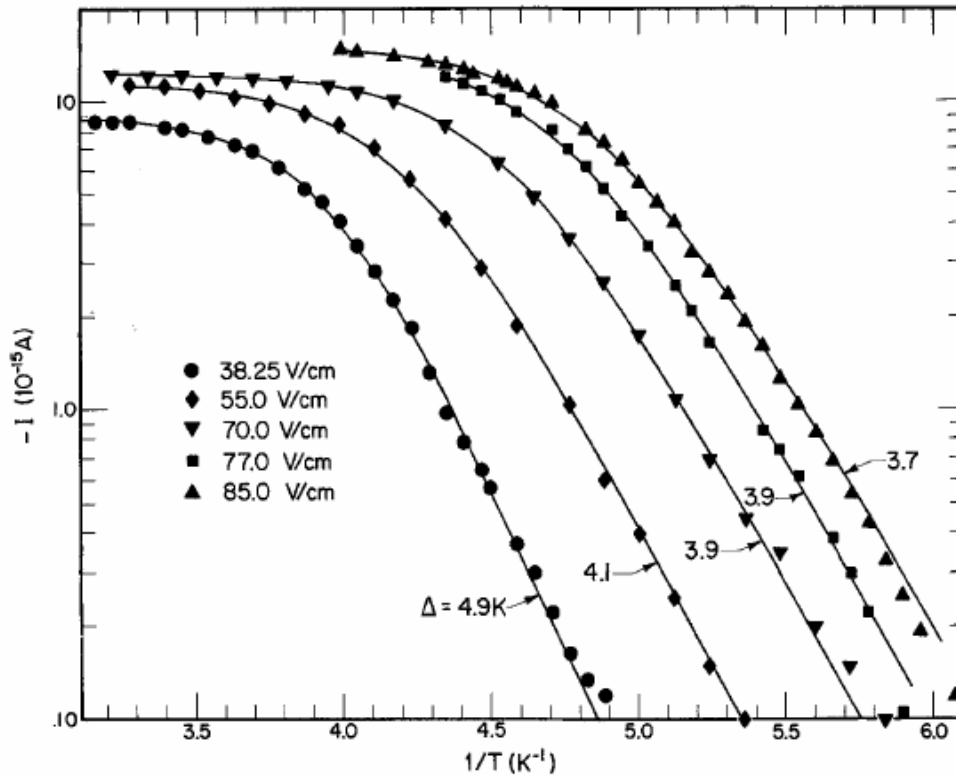
Зависимость тока от температуры через поверхность гелия

M.Kuchnir, Pat R. Roach, and J.B. Petterson, JLTP, **3**, 183 (1970).

W. Schoepe, and G. W. Rayfield, Phys. Rev. A, **7**, 2111 (1973).

Граница расслоения насыщенных растворов

He4 - вакуум

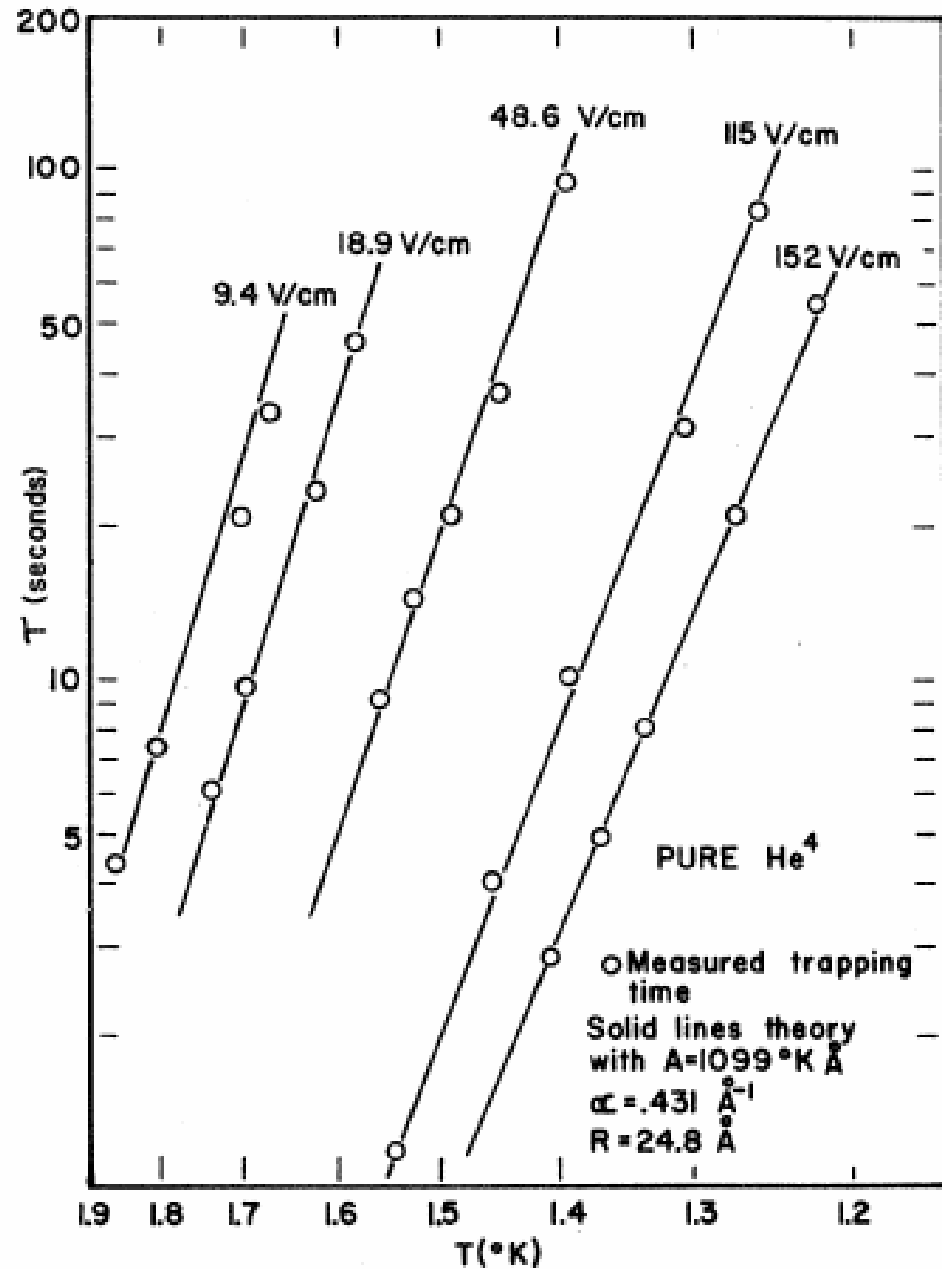
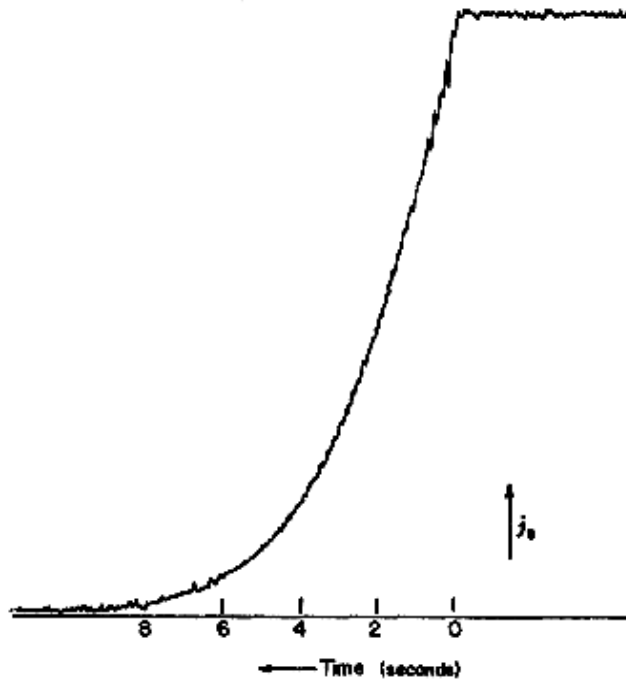


$$I(T) \sim \exp(-\Delta/kT)$$

$$T_{sol} < 0.2 - 0.25K \quad T_{He4} < 1.4 - 2K$$

Определение времени жизни электронного пузырька по измерению тока через поверхность жидкость-пар.

$$I(t) = I(0) \exp(-t/\tau)$$



W. Schoepe, and C.Probst, Physics Letters, **31A**, 490 (1970).

Диффузия электронных пузырьков через потенциальный барьер. Теория Крамерса-Смолуховского

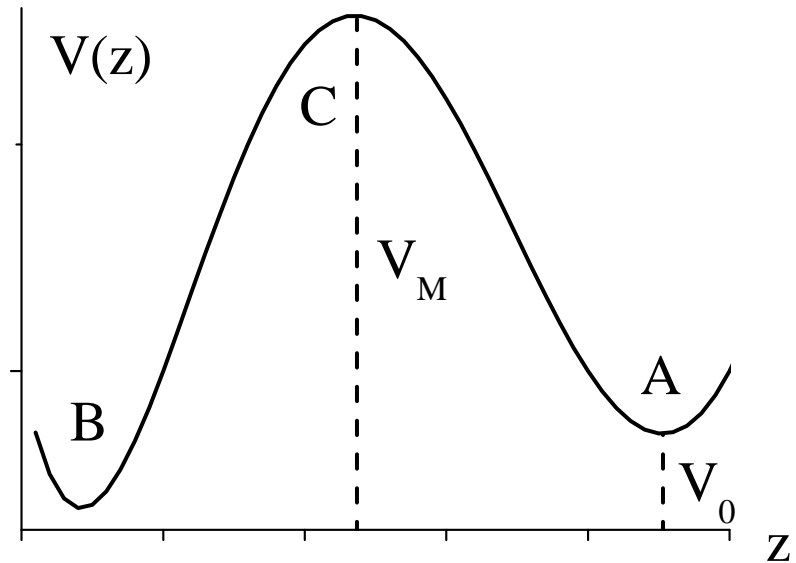
$$\frac{1}{\tau} = \frac{\omega_0 \omega_M \tau_0}{2\pi} \exp\left(-\frac{V_M - V_0}{T}\right)$$

$$V(z) = V_M - \frac{|V_M''|}{2} (z - z_M)^2 \quad V_M'' \equiv -M\omega_M^2$$

$$V(z) = V_0 + \frac{V_0''}{2} (z - z_0)^2 \quad V_0'' \equiv M\omega_0^2$$

$$\tau_0 = \frac{\mu M}{e}$$

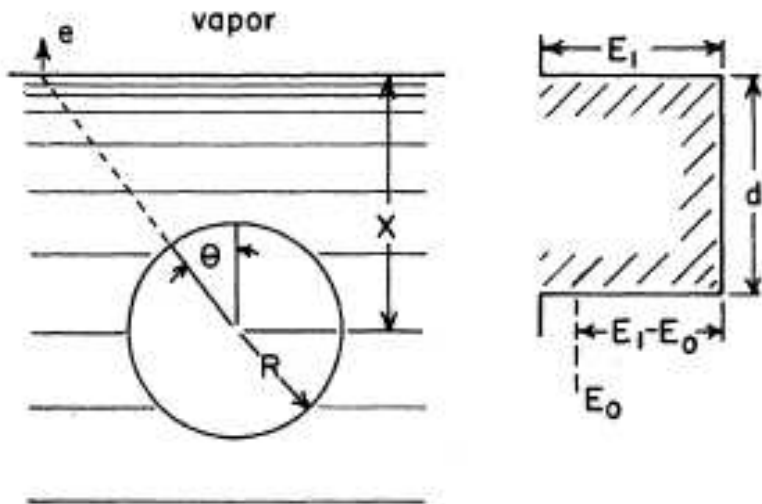
$$V_0 = 2\sqrt{AeE}; \quad z_0^2 = \frac{A}{eE}; \quad V_0'' = \frac{2A}{z_0^3}$$



Reaction-rate theory:
fifty years after Kramers,
Rev. Mod. Phys. **62**(2), (1990)

$$V_M = 43.8K \quad V_M'' \approx 2 * 10^3 K / A \quad \text{-определялись из опыта}$$

Туннельная модель



$$E_1 - E_0 = \hbar^2 \alpha^2 / 2m_e$$

$$P \sim \exp(-2\alpha d)$$

$$n(x) = C \exp(-V(z)/T)$$

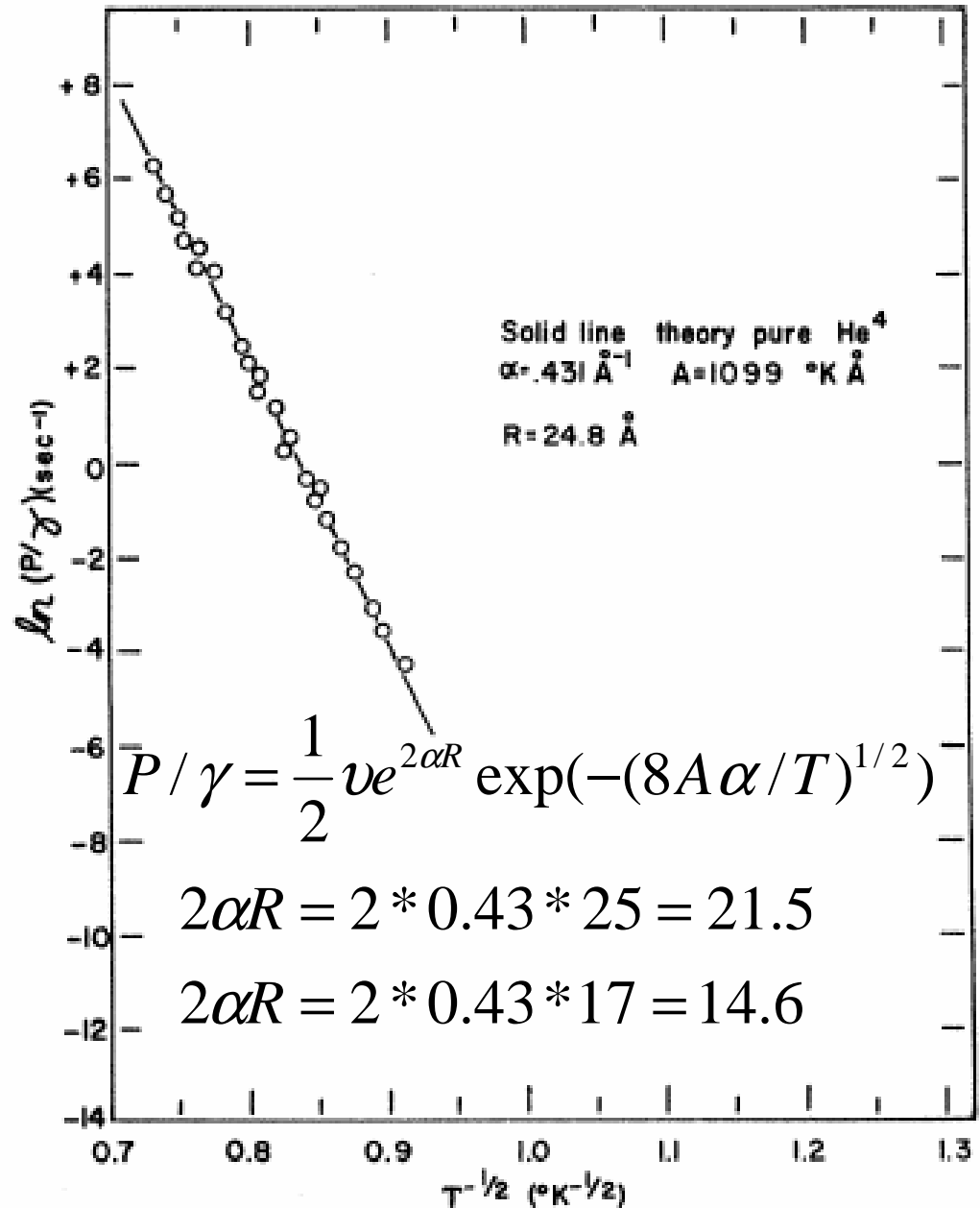
$$\int_0^\infty n(x) dx = N$$

$$j_s = -dN/dt = PN(t) = PN_0 e^{-Pt}$$

$$\alpha = 0.431 \text{ \AA}^{-1}$$

$E_1 - E_0 \sim 1 \text{ эВ}$ определены из эксперимента

$$R = 25 \text{ \AA}$$



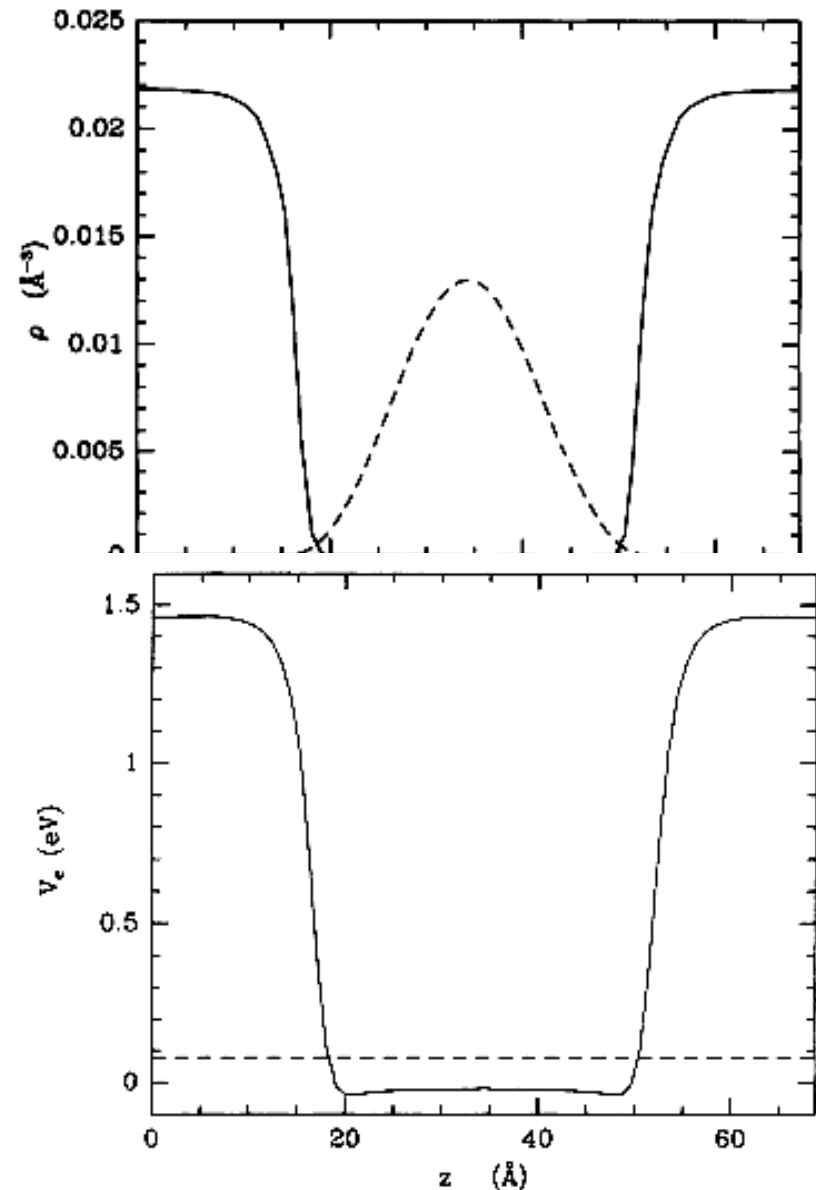
Francenzo Ancilotto and Flavio Toigo, Phys. Rev. B, **50**, 12820 (1994).

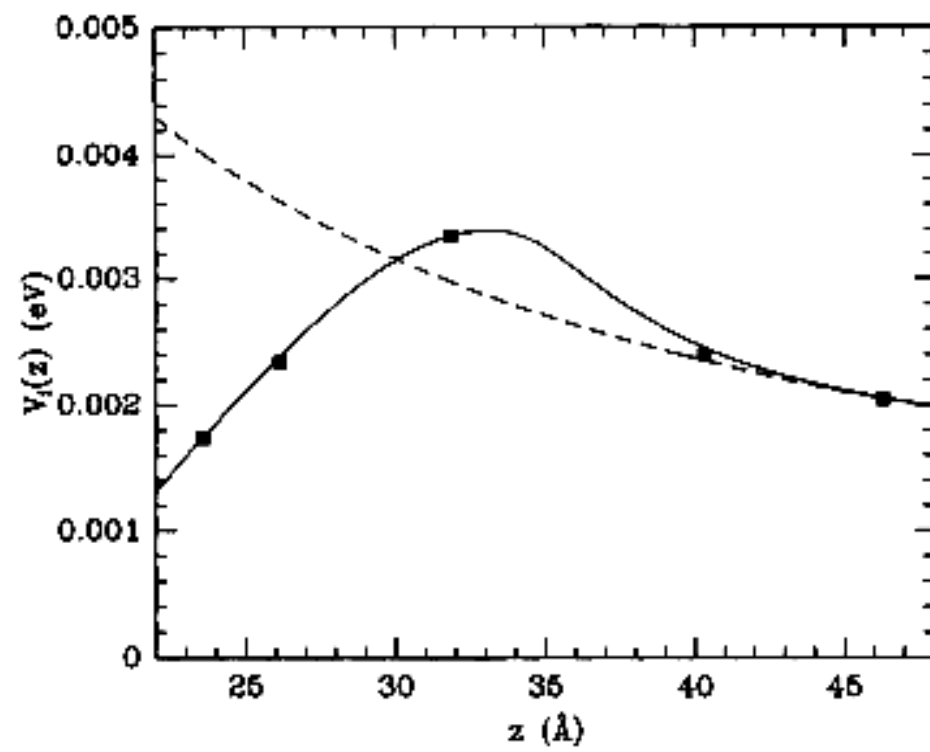
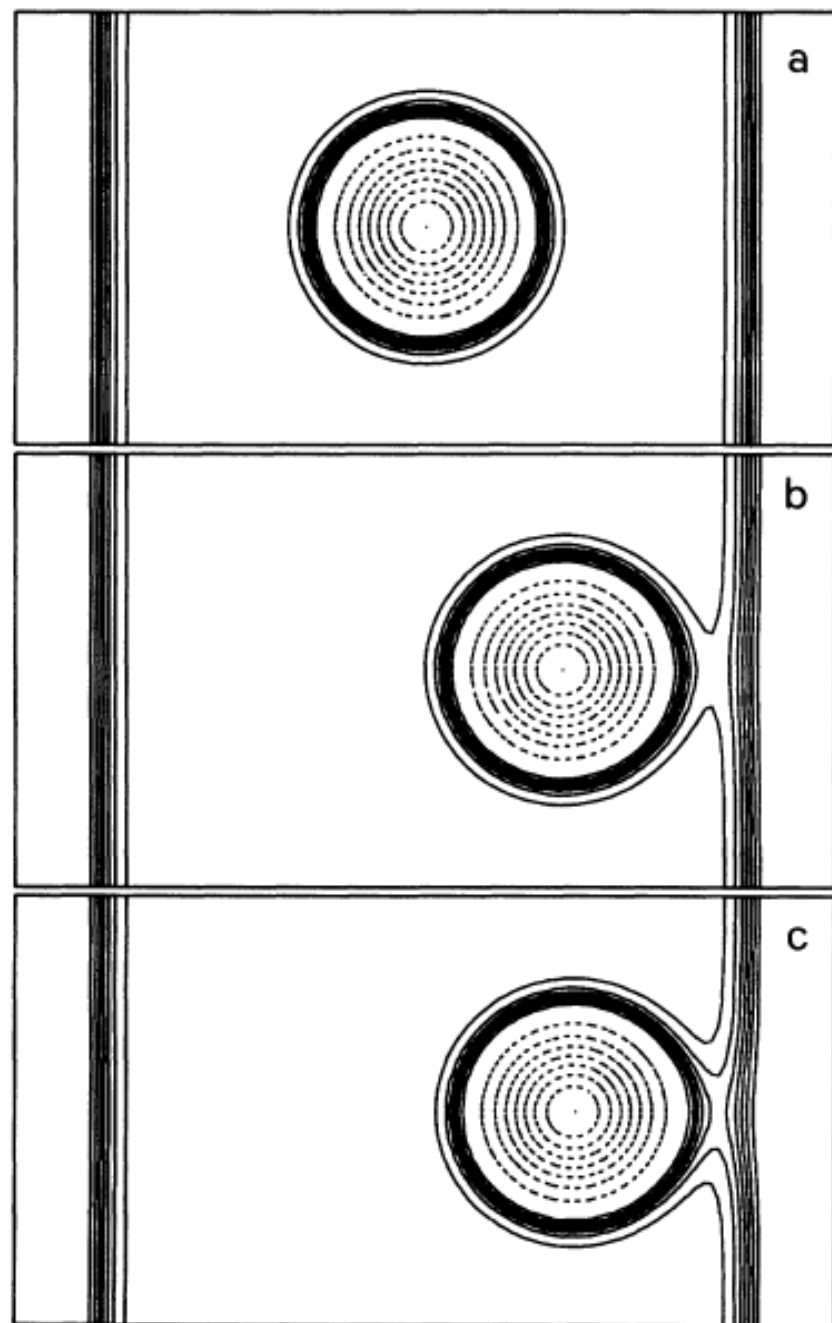
Density-functional approach :

$$E_i[\rho] = \frac{\hbar^2}{2M} \int |\nabla \rho^{1/2}(\vec{r})|^2 d\vec{r} \\ + \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \rho(\vec{r}) \rho(\vec{r}') V_i(|\vec{r} - \vec{r}'|) \\ + \frac{c}{\alpha} \int \rho(\vec{r}) (\bar{\rho}_+)^{1+\gamma} d\vec{r},$$

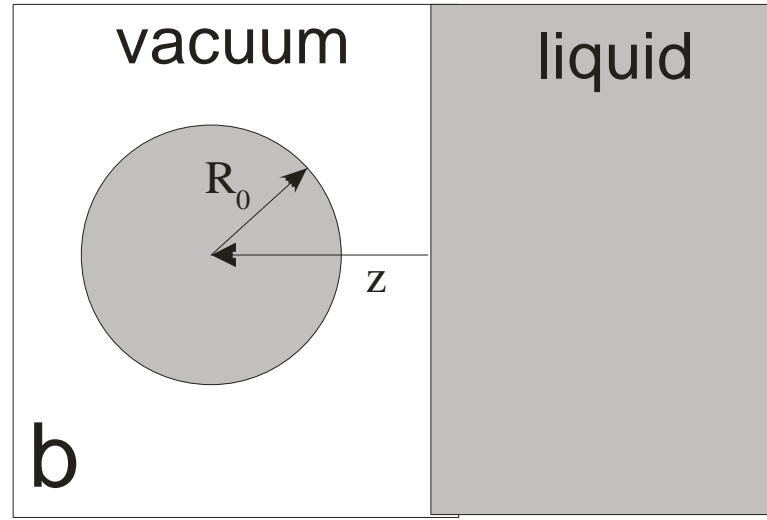
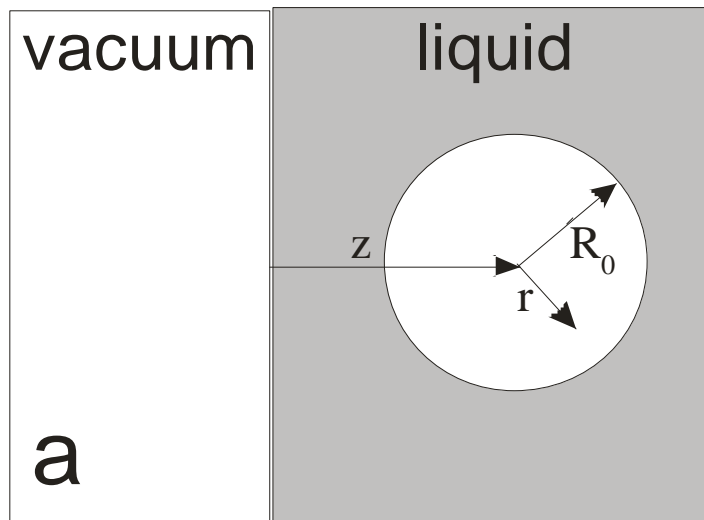
$$E_e[\rho, \Psi] = \frac{\hbar^2}{2m} \int |\nabla \Psi(\vec{r})|^2 d\vec{r} \\ + \int \int \rho(\vec{r}) |\Psi(\vec{r}')|^2 w(|\vec{r} - \vec{r}'|) d\vec{r} d\vec{r}'$$

1. Periodically repeated supercell containing N He atoms and 1 electron
2. Fourier expansion of wave functions
3. Shroedinger equations for wave functions of atoms and electron





Вклад сил Ван-дер-Ваальса в притяжение электронного пузырька к поверхности



Взаимодействие между
двумя вакансиями:

$$V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = -\frac{c_6}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|^6}$$

Взаимодействие вакансии
с вакуумом:

$$v(z) = -\frac{\pi}{6} c_6 n \frac{1}{z^3}$$

$$z \gg R_0 \quad v_+ = v(z)N \quad N \approx \frac{4\pi}{3} R_0^3 n$$

$$V_b(x) = -\varepsilon_b f_b(x)$$

$$\varepsilon_b = \frac{\pi^2 c_6 n^2}{6}; \quad f_b(x) = \frac{2x}{x^2 - 1} - \ln \frac{x+1}{x-1}; \quad x = \frac{z}{R_0} > 0$$

Полный потенциал взаимодействия e^- пузырька с поверхностью жидкости

Электростатические силы:

$$\psi_e^2(r) = \frac{1}{4\pi} \frac{2}{R_0} \frac{\sin^2(\pi r / R_0)}{r^2}$$

$$V_e = \epsilon_e f_e; \quad \epsilon_e = \frac{A}{R_0};$$

$$f_e(x) = \int_0^1 \frac{dy}{y} \ln\left(\frac{x+y}{x-y}\right) \sin^2 \pi y$$

$$V^-(x) = \epsilon_e f_e(x) - \epsilon_b f_b(x) + eER_0 x$$

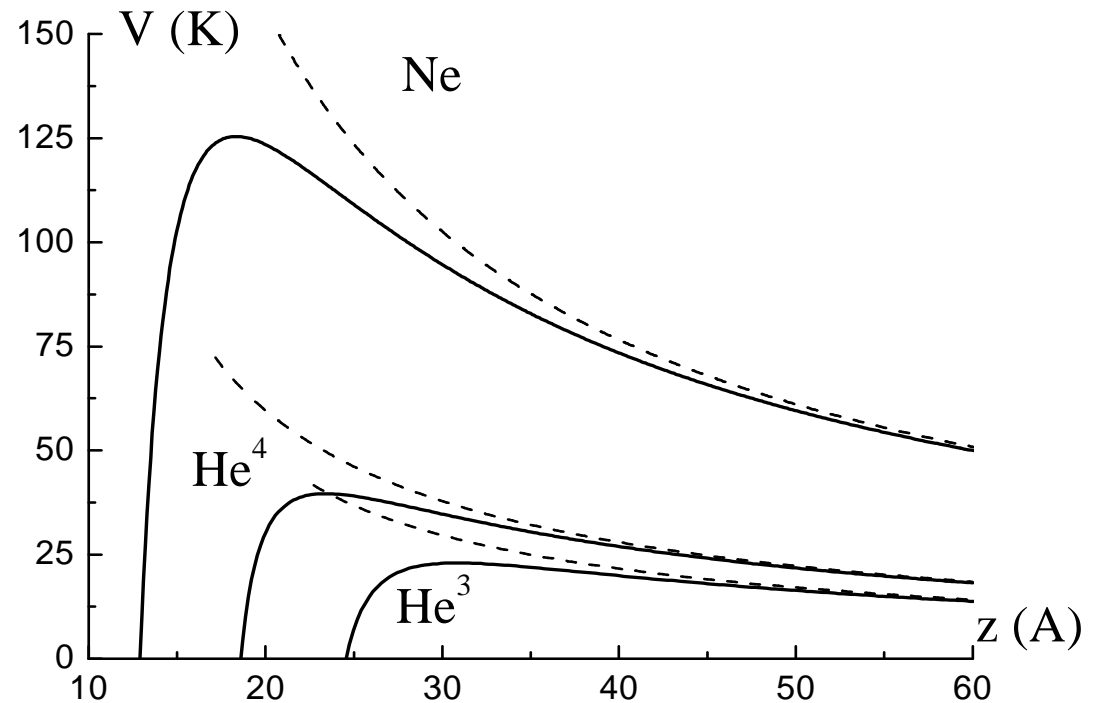
$$He^4 : V_M = 39K$$

$$V_M'' = 0.6K / A^2$$

$He^4 :$

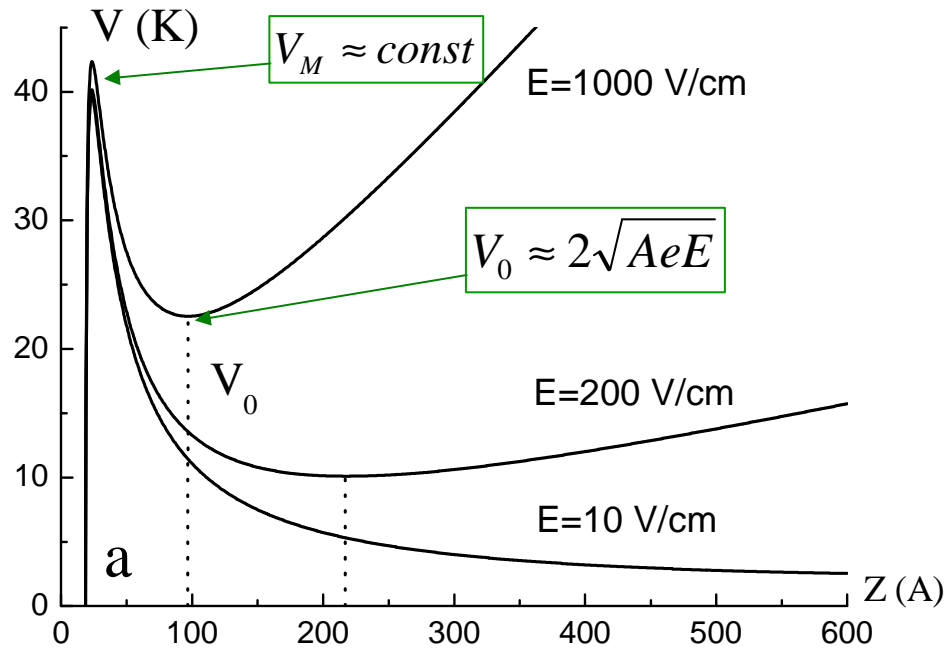
$z > 30A$

$$V^-(z) \approx V(z) = \frac{A}{z} + eEz$$

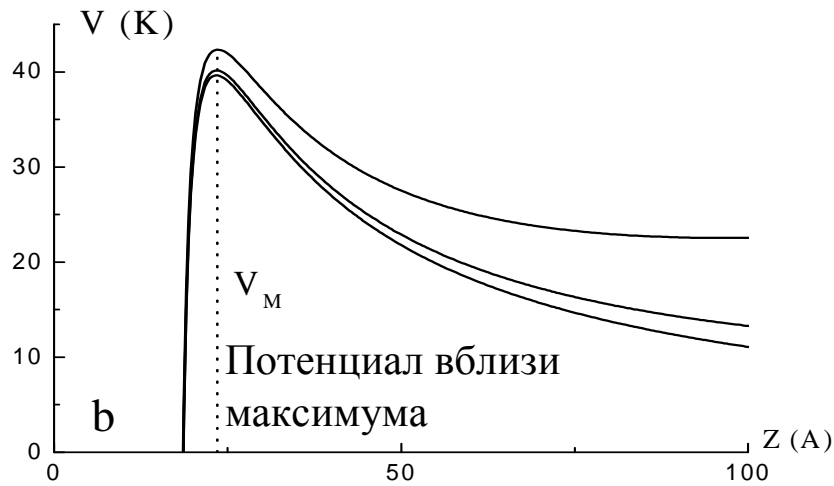
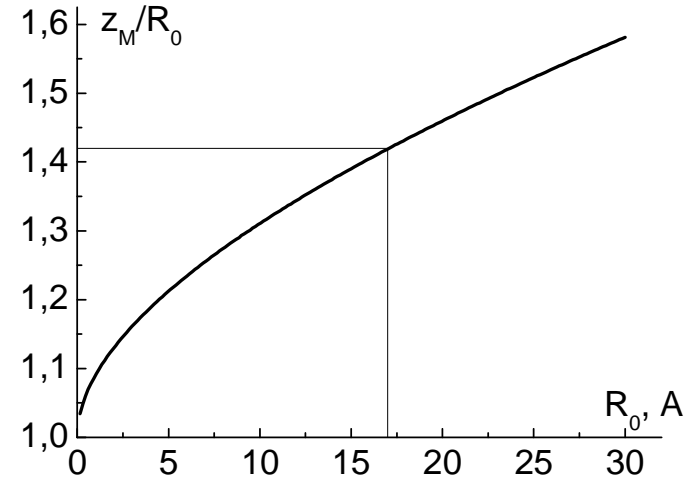


		He ⁴	He ³	Ne ($T = 25$ K)
ε		1.057	1.043	1.19
n	$1/\text{\AA}^3$	0.02184	0.01635	0.037
R_0	\AA	17.0	22.5	10
c_6	$\text{K}\cdot\text{\AA}^6$	$1.038 \cdot 10^4$	$1.038 \cdot 10^4$	$6.14 \cdot 10^4$
ε_e	K	63.8	37.1	304.3
N		449	780	155
ε_b	K	8.14	4.56	138.5
V_M	K	39	23	125
$ V''_M $	$\text{K}/\text{\AA}^2$	0.6	0.21	1.82
ω_M	1/sec	$2.36 \cdot 10^{10}$	$1.22 \cdot 10^{10}$	$3.12 \cdot 10^{10}$

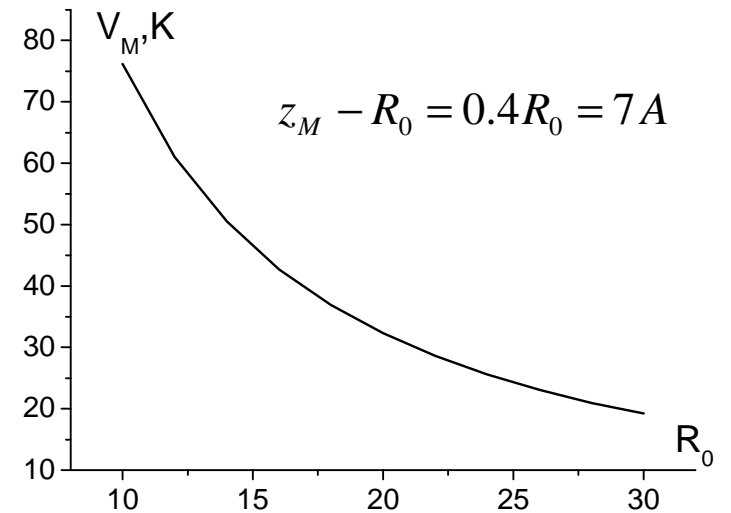
Потенциальная энергия пузырька при разных значениях электрического поля



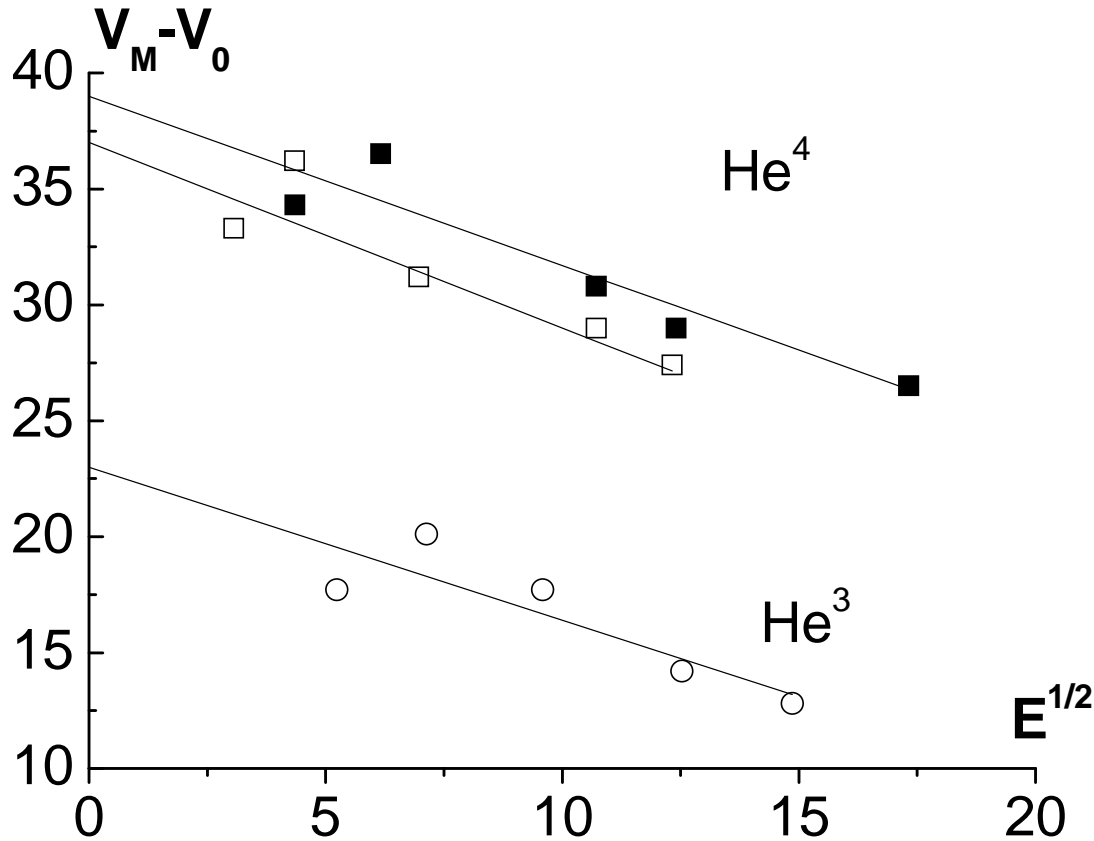
Положение максимума потенциала



Величина максимума потенциала



Зависимость эффективной высоты барьера от электрического поля



He3:
 Расчет: $V_M = 23K,$
 $V_0 = 0,61\sqrt{E}$

Опыт: $V_M = 23K,$
 $V_0 = 0,66\sqrt{E}$

He4:
 Расчет: $V_M = 39K,$
 $V_0 = 0,7\sqrt{E}$

Опыт: $V_M = 37K$ $V_M = 39K$
 $V_0 = 0,8\sqrt{E}$ $V_0 = 0,73\sqrt{E}$

Уравнение Ланжевена: $d\vec{u} / dt = -\beta\vec{u} + \vec{A}(t) + \vec{K}(\vec{r}, t)$ $\vec{K} = -gradU$

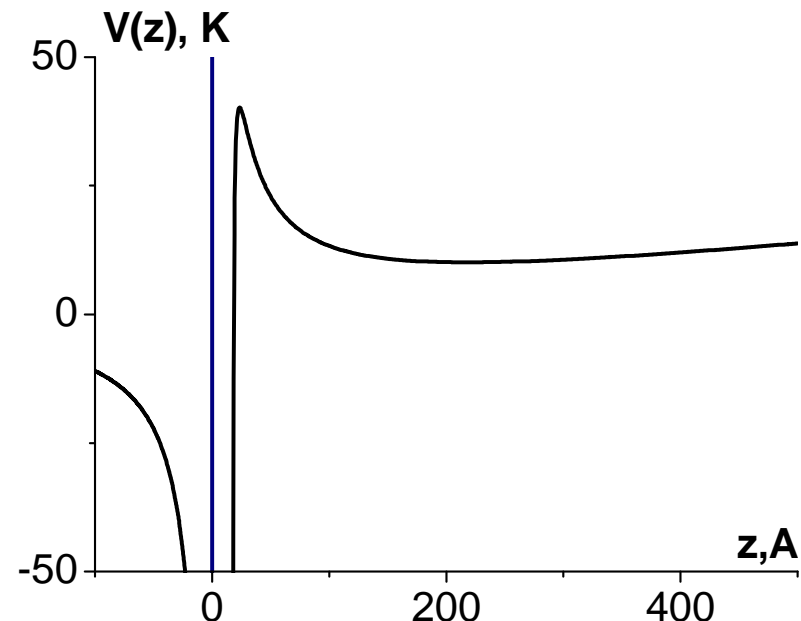
$$W(u, t, u_0) \rightarrow \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp(-(Mu^2 + 2MU)/(2kT)) \quad t \rightarrow \infty$$

Уравнение Лиувилля $\frac{\partial W}{\partial t} + u \frac{\partial W}{\partial x} + K \frac{\partial W}{\partial u} = \beta u \frac{\partial W}{\partial u} + \beta W + \frac{\beta kT}{M} \frac{\partial^2 W}{\partial u^2}$

Упрощение: $(V_M - V_0) / T \gg 1 \Rightarrow$ квазистационарное распределение W_0, W_M

**Прохождение частицы
через потенциальный барьер.
Теория Крамерса.**

Reaction-rate theory:
fifty years after Kramers,
Rev. Mod. Phys. **62**(2), (1990)



Температурная зависимость времени жизни электронного пузырька

$$\tau / \gamma = \exp(V_M / T) \quad \gamma = \frac{2\pi}{\omega_0} \exp(-V_0 / T)$$

Параметры, рассчитанные для He4:

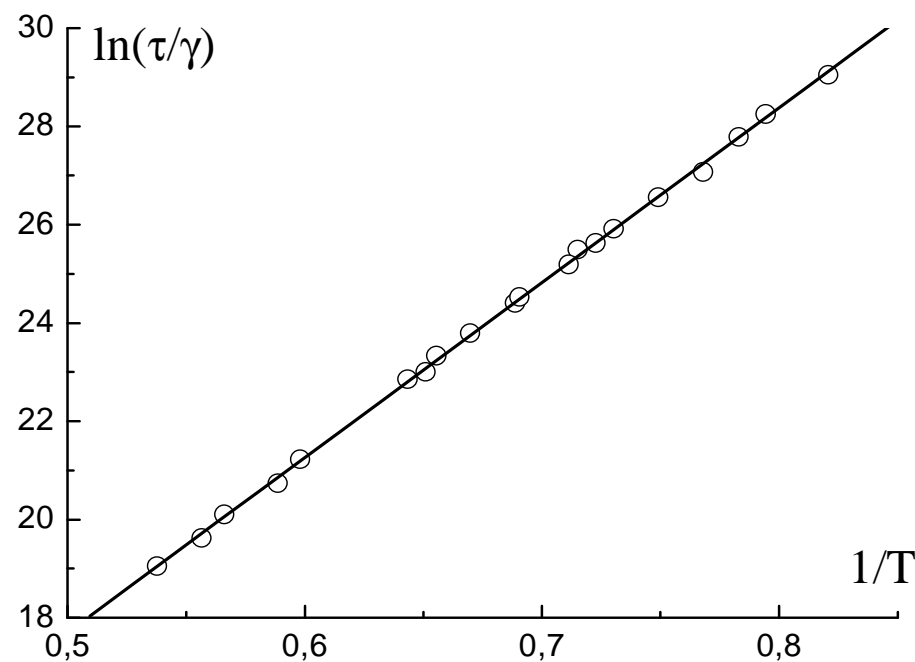
$$V_M = 39K, \quad V_0 = 0,7\sqrt{EK}, \quad \omega_0 = 8 \cdot 10^6 E^{3/4} \frac{1}{c}$$

Из графика:

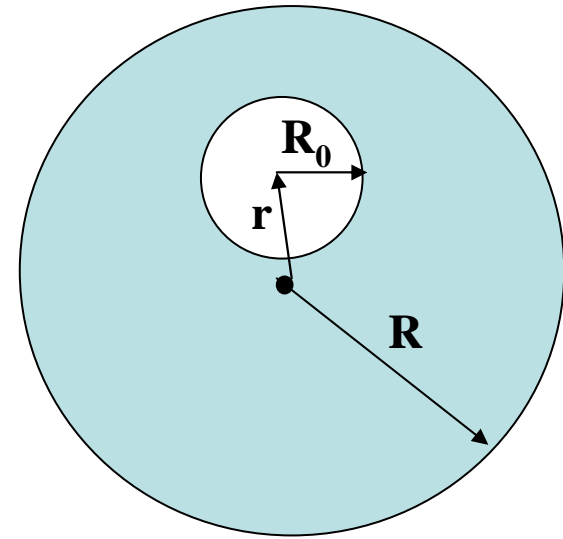
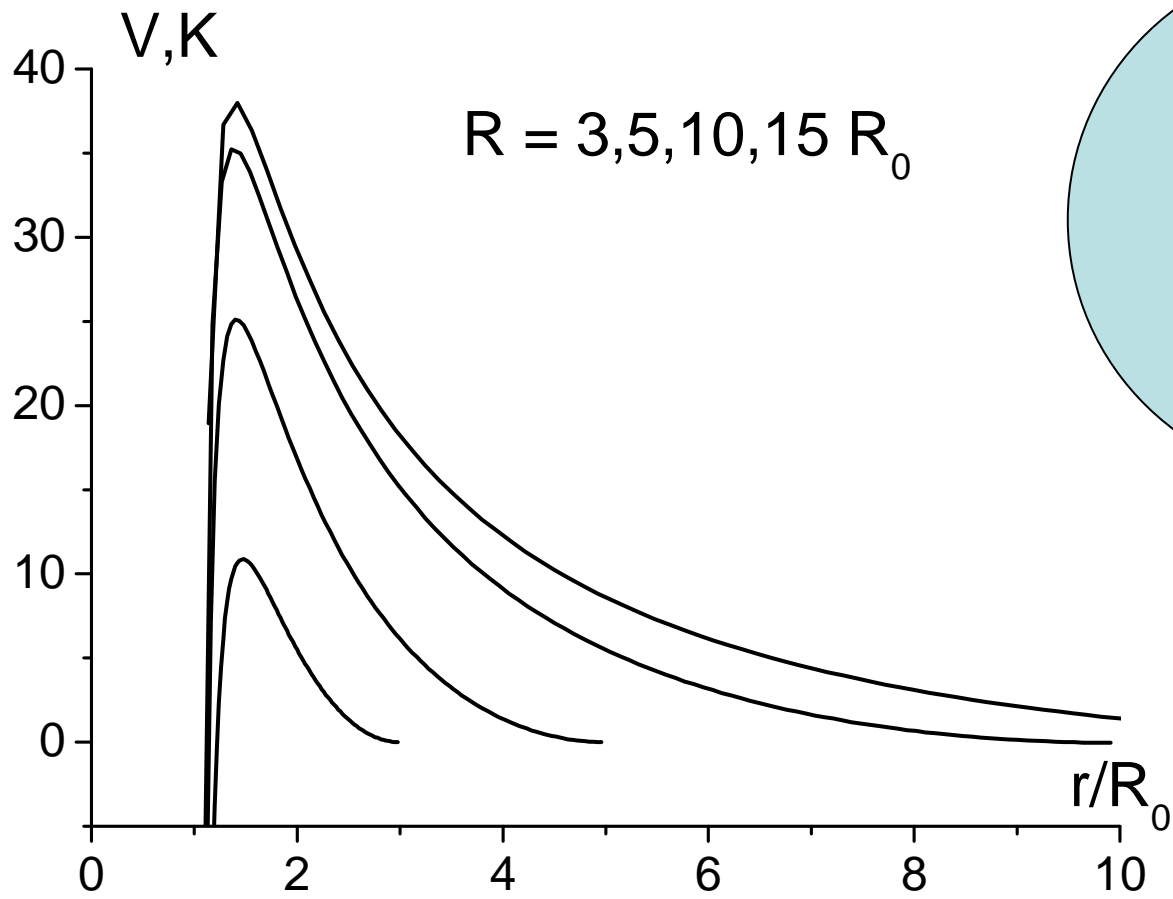
$$V_M = 35,6K,$$

$$V_0 = 0,63\sqrt{EK},$$

$$\omega_0 = 18 \cdot 10^6 E^{3/4} \frac{1}{c}$$



Отрицательные ионы в нанокляпях гелия



Главный результат (применение теории Крамерса к нашей задаче)

$$\frac{1}{\tau} = \frac{j}{v_A} = \frac{\omega_0}{2\pi\omega_M} \left(\sqrt{\beta^2 / 4 + \omega_M^2} - \beta / 2 \right) \exp\left(-\frac{V_M - V_0}{T} \right)$$

j – поток частиц через поверхность

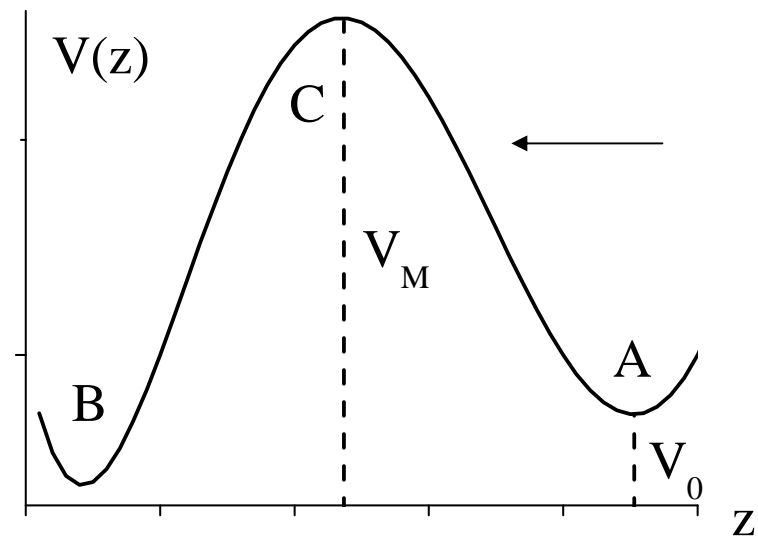
v_A – число частиц в потенциальной яме А

$$\beta = 1/\tau_0 = \frac{e}{\mu M}$$

M – присоединенная масса иона

μ – подвижность иона

$$V_0'' \equiv M\omega_0^2 \quad V_M'' \equiv -M\omega_M^2$$



Время жизни пузырька у поверхности гелия

$$\tau_0 \gg 1 \quad \beta = 1/\tau_0 = \frac{e}{\mu M} \rightarrow 0 \quad \frac{1}{\tau} = \frac{\omega_0}{2\pi} \exp\left(-\frac{V_M - V_0}{T} \right)$$