

УРОВНИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ, ЛОКАЛИЗОВАННЫХ НАД ПОВЕРХНОСТЬЮ ИНЕРТНОЙ ПЛЕНКИ С АДРЕСНЫМИ ЭЛЕКТРОДАМИ

*А. В. Петрин**

*Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
125412, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 20 июля 2012 г.

Рассматривается задача нахождения потенциальной энергии и энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью тонких жидких и твердых инертных пленок с помощью адресных электродов, расположенных под пленкой.

DOI: 10.7868/S0044451013030140

1. ВВЕДЕНИЕ

Явление локализации электронов над свободной поверхностью некоторых сжиженных инертных газов (например, ^3He , ^4He и Ne) и твердых водорода и неона хорошо изучено теоретически [1–5] и экспериментально [6–10]. Локализация электронов у поверхности подобных диэлектриков обусловлена, с одной стороны, слабыми силами электростатического притяжения электрона к индуцированным зарядам на поверхности диэлектрика, а с другой — силами отталкивания, которые возникают из-за обменного взаимодействия электрона с атомами поверхности. Величина потенциального барьера по преодолению сил отталкивания, например, для жидкого гелия имеет порядок $V_0 \sim 1\text{В}$. Эта величина достаточно велика и поэтому при теоретическом анализе спектра электронов приближенно полагают, что потенциальный барьер со стороны рассматриваемых диэлектриков бесконечно велик [11].

В последнее десятилетие стало ясно, что двумерный газ электронов, локализованных у поверхности жидкого гелия, твердого неона и водорода, может найти применение в области квантовых вычислений [12–15]. При миниатюризации элементов новых устройств толщина пленки (как в [15]), расположенной над проводящими элементами адресных электродов, с необходимостью должна уменьшаться. Как показано в работе [16], из-за малости поля-

ризуемости вещества инертных пленок, пригодных для приповерхностной локализации электронов, поляризационные заряды на поверхности проводника под пленкой будут существенно влиять на притяжение электрона к поверхности и на его энергетический спектр при толщине пленки, меньшей примерно 10 мкм [16]. Поэтому при расчете потенциальной ямы, в которой локализуется электрон у поверхности пленки над управляющим электродом, необходимо адекватно описывать потенциал электрода и учитывать при этом малую толщину пленки. Как правило, это является трудной задачей. Так, в работе [17] в качестве управляющего электрода используется закругленный металлический цилиндр, выходящий из заземленного металлического основания. На электрод подается управляющий потенциал. Для теоретических оценок в работе [17] распределение потенциала описывается приближенно потенциалом сферы закругленного электрода, а влиянием металлического основания под пленкой пренебрегается.

Однако, очевидно, что конструкция работы [17] сложна, несовместима с технологией плазменной микролитографии и не может быть применена для массового производства. Другими словами, конструкции адресных электродов, пригодные для массового производства, должны быть совместимыми с планарной литографией производства интегральных схем.

В настоящей работе предлагается одна из таких планарных конструкций с размерами, достижимыми на современном уровне развития технологии. Для решения задачи нахождения потенциаль-

*E-mail: a_petrin@mail.ru

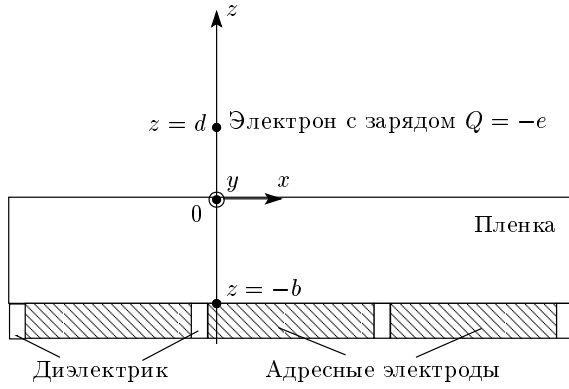


Рис. 1. Геометрия задачи: расположение пленки, адресных электродов, координатных осей

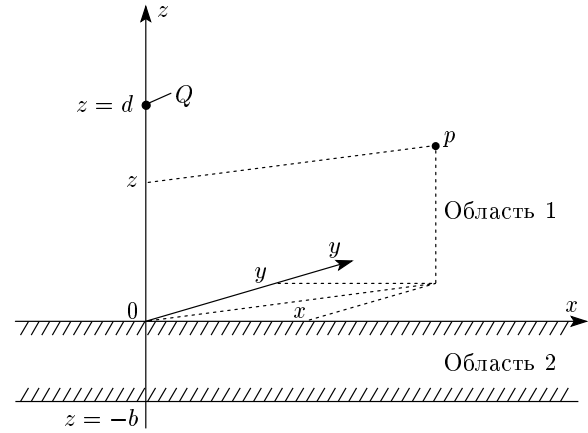


Рис. 2. Система координат и геометрия задачи

ной энергии электрона и спектра электронов, локализованных над поверхностью инертной пленки в потенциальных ямах, созданных плоскими адресными электродами, применяется метод, основанный на работе Зоммерфельда [18] и подробно изложенный, например, в [16, 19].

2. ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ ЭЛЕКТРОНА НАД ПОВЕРХНОСТЬЮ ИНЕРТНОЙ ПЛЕНКИ И СИСТЕМОЙ АДРЕСНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ

Рассмотрим сначала электрон, локализованный над инертной пленкой постоянной толщины. Систему прямоугольных декартовых координат выберем так, чтобы электрон находился на оси z , а оси x и y — на внешней поверхности пленки (см. рис. 1). Пусть под этой пленкой расположена система электродов, создающая некоторое заданное распределение потенциала $\psi(x, y)$ на нижней границе пленки.

Рассмотрим (см. рис. 2) точечный заряд величины Q с объемной плотностью $q(x, y, z)$:

$$q = Q\delta(x)\delta(y)\delta(z - d), \quad (1)$$

где $\delta(x)$ — дельта-функция, d — координата заряда по оси z . Пусть этот заряд расположен над инертной диэлектрической пленкой толщиной b .

Обозначим область над поверхностью пленки $z > 0$ индексом $j = 1$, область внутри пленки — индексом $j = 2$.

Уравнения электростатики можно записать через потенциал φ_j в двух областях в виде

$$\Delta\varphi_j = -\frac{q}{\varepsilon_j\varepsilon_0}, \quad (2)$$

где Δ — оператор Лапласа, ε_j — относительная диэлектрическая проницаемость j -й области, ε_0 — диэлектрическая проницаемость вакуума. В данной работе используется система единиц СИ.

Граничные условия на свободной поверхности пленки требуют непрерывности тангенциальных составляющих полей \mathbf{E} , а также нормальных составляющих полей $\mathbf{D} = \varepsilon\varepsilon_0\mathbf{E}$. Граничное условие на нижней поверхности пленки — равенство потенциала потенциалу адресных электродов $\psi(x, y)$. Кроме того, будем предполагать, что на бесконечности при $z \rightarrow \infty$ потенциал стремится к нулю.

Электрическое поле и потенциал можно представить в виде фурье-разложений:

$$\mathbf{E}(x, y, z) = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \tilde{\mathbf{E}}(\xi, \eta, z),$$

$$\varphi(x, y, z) = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \tilde{\varphi}(\xi, \eta, z).$$

Аналогичное выражение можно написать для q :

$$q(x, y, z) = (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \tilde{q}(\xi, \eta, z).$$

Используя преобразование Фурье, найдем фурье-образ распределения заряда (1):

$$\tilde{q}(\xi, \eta, z) = Q\delta(z - d). \quad (3)$$

Используя фурье-представления полей, уравнение (2) в двух областях можно записать в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \xi^2 - \eta^2\right) \tilde{\varphi}_j = -\frac{Q}{\varepsilon_j\varepsilon_0} \delta(z - d), \quad j = 1, 2. \quad (4)$$

Уравнения (4) при фиксированных значениях ξ и η есть обыкновенные дифференциальные уравнения относительно переменной z . Задача состоит в нахождении из уравнений (4) функций $\tilde{\varphi}_j$ в рассматриваемых областях. По известному фурье-образу потенциала $\tilde{\varphi}_j$ составляющие $\tilde{\mathbf{E}}_j$ определяются выражениями: $\tilde{E}_{jx} = -i\xi\tilde{\varphi}_j$, $\tilde{E}_{jy} = -i\eta\tilde{\varphi}_j$, $\tilde{E}_{jz} = -\partial\tilde{\varphi}_j/\partial z$.

В области 1 первое уравнение (4) при $j = 1$ является неоднородным:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - \xi^2 - \eta^2\right)\tilde{\varphi}_1 = -\frac{Q}{\varepsilon_1\varepsilon_0}\delta(z-d).$$

Его частное решение имеет вид

$$(\tilde{\varphi}_1)_p = \frac{e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}|z-d|}}{2\varepsilon_1\varepsilon_0\sqrt{\xi^2+\eta^2}}Q.$$

Поэтому общее решение уравнения записывается как

$$\tilde{\varphi}_1 = S'_1 e^{\sqrt{\xi^2+\eta^2}z} + S_1 e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}z} + \frac{e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}|z-d|}}{2\varepsilon_1\varepsilon_0\sqrt{\xi^2+\eta^2}}Q,$$

где $S_1 = S_1(\xi, \eta)$ и $S'_1 = S'_1(\xi, \eta)$ — функции, не зависящие от z .

Граничное условие при $z \rightarrow \infty$ дает $S'_1 = 0$. Следовательно, электрический потенциал в первой области (в области над поверхностью жидкости) будет иметь вид

$$\tilde{\varphi}_1 = S_1 e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}z} + \frac{e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}|z-d|}}{2\varepsilon_1\varepsilon_0\sqrt{\xi^2+\eta^2}}Q. \quad (5)$$

Отметим, что в выражении (5) второй член представляет собой фурье-образ потенциала точечного заряда Q , а первый член — фурье-образ потенциала всех остальных зарядов (зарядов электродов и индуцированных зарядов на поверхности пленки), который и будет определять потенциальную энергию заряда Q .

В области 2 расположены два линейно независимых решения (уравнение (4) в этой области однородно), поэтому

$$\tilde{\varphi}_2 = S'_2 e^{\sqrt{\xi^2+\eta^2}z} + S_2 e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}(z+b)},$$

где $S_2 = S_2(\xi, \eta)$ и $S'_2 = S'_2(\xi, \eta)$ — функции, не зависящие от z .

Решения уравнений (4) должны удовлетворять граничным условиям на двух границах сред: на первой границе диэлектрика и вакуума при $z = 0$ и на второй границе диэлектрика и адресных электродов при $z = -b$.

На первой границе $z = 0$ запишем условия непрерывности тангенциальных составляющих напряженностей электрического поля \tilde{E}_{jx} , \tilde{E}_{jy} и нормальной составляющей индукции электрического поля $\varepsilon_j \tilde{E}_{jz}$ на границе:

$$\tilde{\varphi}_1|_{z=0} = \tilde{\varphi}_2|_{z=0}$$

— равенство тангенциальных составляющих электрического поля,

$$\varepsilon_1 \frac{\partial \tilde{\varphi}_1}{\partial z} \Big|_{z=0} = \varepsilon_2 \frac{\partial \tilde{\varphi}_2}{\partial z} \Big|_{z=0}$$

— равенство нормальных компонент индукции.

На второй границе $z = -b$ запишем условие равенства фурье-образа потенциала $\tilde{\varphi}_2$ фурье-образу потенциала адресных электродов $\tilde{\psi}$:

$$\tilde{\varphi}_2|_{z=-b} = \tilde{\psi}(\xi, \eta),$$

где

$$\tilde{\psi}(\xi, \eta) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-i\xi x - i\eta y} \psi(x, y).$$

Подставляя в граничные условия выражения для фурье-образов потенциалов, получим систему уравнений:

$$\begin{aligned} S_1 - S'_2 - e^{-\beta b} S_2 &= -\gamma, \\ S_1 + \varepsilon S'_2 - \varepsilon e^{-\beta b} S_2 &= \gamma, \\ e^{-\beta b} S'_2 + S_2 &= \tilde{\psi}, \end{aligned} \quad (6)$$

где для упрощения записи введены обозначения

$$\gamma = \frac{Q e^{-\beta d}}{2\varepsilon_0\varepsilon_1\beta}, \quad \beta = \sqrt{\xi^2 + \eta^2}, \quad \varepsilon = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1}.$$

Из системы уравнений (6) найдем S_1 :

$$S_1 = -\frac{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{Q e^{-\beta d}}{2\varepsilon_0\varepsilon_1\beta} + \frac{\varepsilon}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \tilde{\psi}.$$

Тогда приращение потенциальной энергии при изменении заряда на dQ равно

$$\begin{aligned} dU &= dQ \varphi_p(0, 0, d, Q) = (2\pi)^{-2} dQ \times \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} S_1(\xi, \eta, Q) e^{-\sqrt{\xi^2+\eta^2}d}. \end{aligned}$$

Следовательно, полная энергия взаимодействия электрона будет равна интегралу правой части этого выражения от нуля до $-e$, т. е.

$$\begin{aligned}
 U &= (2\pi)^{-2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \times \\
 &\times \left(\int_0^{-e} S_1(\xi, \eta, Q) dQ \right) e^{-\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z} \Bigg|_{\substack{x=0 \\ y=0 \\ z=d}} = \\
 &= -\frac{1}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta e^{i\xi x + i\eta y} \times \\
 &\times \left(\frac{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^2 e^{-\beta d}}{4\varepsilon_0 \varepsilon_1 \beta} + \right. \\
 &\left. + \frac{e\varepsilon}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \tilde{\psi} \right) e^{-\sqrt{\xi^2 + \eta^2} z} \Bigg|_{\substack{x=0 \\ y=0 \\ z=d}}
 \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \times \\
 &\times \left(\frac{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-\beta d}}{\beta} \right) e^{i\xi x + i\eta y - \beta z} \Bigg|_{\substack{x=0 \\ y=0 \\ z=d}} - \\
 &- \frac{e\varepsilon}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\tilde{\psi} e^{i\xi x + i\eta y - \beta z}}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \Bigg|_{\substack{x=0 \\ y=0 \\ z=d}}
 \end{aligned}$$

или

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \times \\
 &\times \left(\frac{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-2\beta d}}{\beta} \right) - \frac{e\varepsilon}{4\pi^2} \times \\
 &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\tilde{\psi} e^{-\beta d}}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)}. \quad (7)
 \end{aligned}$$

Заметим, что при выводе (7) мы использовали систему координат (см. рис. 1), в которой электрон имеет координаты $(x, y, z) = (0, 0, d)$.

Обозначим первый член в правой части выражения (7) как U_0 — это потенциальная энергия электрона в случае, когда все адресные электроды имеют нулевой потенциал $\tilde{\psi} = 0$ (заземлены). Такое выражение было получено в работе [16]. Обозначим второй член (7) как U_e — это вклад в потенциальную энергию ненулевых потенциалов адресных электродов в случае их активации (подаче на них напряжения).

Исследование влияния на уровни электрона в потенциальной яме этих потенциалов является главной целью настоящей работы.

Заметим, что U_0 является потенциальной энергией, которая не зависит от потенциалов электродов и зависит, в силу симметрии, только от расстояния d от электрона до поверхности пленки. Поэтому U_0 можно выразить через одномерный интеграл (см. [16]):

$$U_0(d) = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_1\varepsilon_0 d} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon - \operatorname{th}(b\vartheta/2d)}{\varepsilon + \operatorname{th}(b\vartheta/2d)} e^{-\vartheta} d\vartheta. \quad (8)$$

Нам необходимо преобразовать формулу (7) таким образом, чтобы представить потенциальную энергию электрона как функцию координат электрона в системе координат, жестко связанной с электродами. Пусть эта система координат получена смещением системы координат рис. 1 на вектор $(x_0, y_0, 0)$ вдоль поверхности. И пусть в этой новой системе координат распределение координат по поверхности адресных электродов определяется функцией $\varphi_a(x, y)$ и ее фурье-образ равен $\tilde{\varphi}_a(\xi, \eta)$. Тогда фурье-образ $\tilde{\psi}(\xi, \eta)$ в прежней системе координат равен

$$\begin{aligned}
 \tilde{\psi}(\xi, \eta) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-i\xi x - i\eta y} \varphi_a(x - x_0, y - y_0) = \\
 &= \int_{-\infty}^{\infty} ds \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\xi(x_0 + s) - i\eta(y_0 + w)} \varphi_a(s, w) = \\
 &= e^{-i\xi x_0 - i\eta y_0} \int_{-\infty}^{\infty} ds \int_{-\infty}^{\infty} dw e^{-i\xi s - i\eta w} \varphi_a(s, w) = \\
 &= e^{-i\xi x_0 - i\eta y_0} \tilde{\varphi}_a(\xi, \eta).
 \end{aligned}$$

Подставляя это выражение в (7), получим

$$\begin{aligned}
 U &= -\frac{e^2}{16\pi^2 \varepsilon_0 \varepsilon_1} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left(\frac{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \times \right. \\
 &\times \frac{e^{-2\beta d}}{\beta} \Bigg) - \frac{e\varepsilon}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \times \\
 &\times \frac{e^{-i\xi x_0 - i\eta y_0} \tilde{\varphi}_a(\xi, \eta) e^{-\beta d}}{\varepsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)}. \quad (9)
 \end{aligned}$$

В новой системе координат (см. рис. 3) электрон расположен в точке $(-x_0, -y_0, d)$, тогда в этой систе-

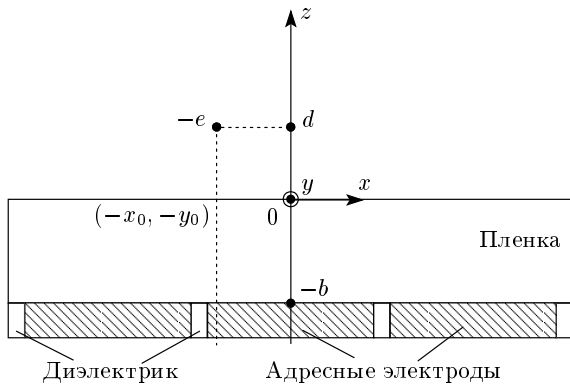


Рис. 3. Система координат, жестко связанная с электродами, а не с электроном, как на рис. 1

ме координат потенциальная энергия (9) электрона с координатами (x, y, z) выражается формулой

$$U(x, y, z) = U_0(z) + U_e(x, y, z) = -\frac{e^2}{16\pi^2\epsilon_0\epsilon_1} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left(\frac{\epsilon \operatorname{ch}(\beta b) - \operatorname{sh}(\beta b)}{\epsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)} \frac{e^{-2\beta z}}{\beta} \right) - \frac{e\epsilon}{4\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{e^{i\xi x + i\eta y - \beta z} \tilde{\varphi}_a(\xi, \eta)}{\epsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)}. \quad (10)$$

Учитывая (8) и то, что, как правило, с высокой точностью можно положить диэлектрическую проницаемость паров вещества пленки равной единице, можно считать ϵ относительной проницаемостью пленки. Тогда выражение (10) можно записать в виде

$$U(x, y, z) = U_0(z) + U_e(x, y, z) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon - \operatorname{th}(b\vartheta/2z)}{\epsilon + \operatorname{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{e\epsilon}{4\pi^2} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{e^{i\xi x + i\eta y - \beta z} \tilde{\varphi}_a(\xi, \eta)}{\epsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)}. \quad (11)$$

Отметим, что второй член в общем случае нельзя представить в виде одномерного интеграла.

3. ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ: АКТИВНЫЙ КВАДРАТНЫЙ АДРЕСНЫЙ ЭЛЕКТРОД

Рассмотрим в качестве примера частный случай распределения потенциала на плоскости с адресными электродами. Пусть потенциал всей плоскости

$z = -b$ имеет нулевое значение, за исключением одной квадратной области электрода со стороной a и центром на оси z , где потенциал равен V . Фурье-образ такого потенциала есть

$$\tilde{\varphi}_a(\xi, \eta) = \int_{-a/2}^{a/2} dx \int_{-a/2}^{a/2} dy e^{-i\xi x - i\eta y} V = \frac{4V}{\xi\eta} \sin \frac{a\xi}{2} \sin \frac{a\eta}{2}.$$

Подставляя эту формулу в (11), запишем следующее выражение для потенциальной энергии электрона в полученной одиночной потенциальной яме над поверхностью инертной пленки над квадратным активным электродом:

$$U(x, y, z) = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 z} \int_0^{\infty} \frac{\epsilon - \operatorname{th}(b\vartheta/2z)}{\epsilon + \operatorname{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{e\epsilon V}{\pi^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\xi \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \frac{\sin(a\xi/2) \sin(a\eta/2)}{\xi\eta} \times \frac{e^{i\xi x + i\eta y - \beta z}}{\epsilon \operatorname{ch}(\beta b) + \operatorname{sh}(\beta b)}. \quad (12)$$

4. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ. ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД НАХОЖДЕНИЯ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ ЭНЕРГИИ

Уравнение Шредингера для стационарных состояний электрона в потенциальной яме у поверхности пленки имеет вид

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - U(x, y, z)\psi = -E\psi. \quad (13)$$

Это уравнение определяет дискретную часть спектра электронов у поверхности. Из-за притягивающего потенциала адресных электродов электрон будет локализован в связанном состоянии вблизи электродов в плоскости пленки. Координата z меняется от нуля на внешней поверхности пленки до бесконечности далеко от нее. Граничные условия для ψ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \psi|_{x \rightarrow -\infty} = 0, & \quad \psi|_{x \rightarrow +\infty} = 0, \\ \psi|_{y \rightarrow -\infty} = 0, & \quad \psi|_{y \rightarrow +\infty} = 0, \\ \psi|_{z \rightarrow +0} = 0, & \quad \psi|_{z \rightarrow +\infty} = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

В уравнении Шредингера для стационарных состояний (13), (14) переменная z меняется в интер-

вале $0 < z < \infty$. Воспользуемся преобразованием переменных, которое было использовано в работе [16]. Сделаем в (13) замену переменных [20] $z = \zeta D_z / (1 - \zeta)$, где D_z — характерная длина задачи по оси z , которая будет определена ниже. Таким преобразованием интервал $0 < z < \infty$ отображается в безразмерный интервал $0 < \zeta < 1$.

Кроме того, в (13) переменные x и y изменяются в интервалах $-\infty < x < \infty$ и $-\infty < y < \infty$, поэтому для них сделаем замены переменных $x = \tau D_x / (1 - \tau^2)$ и $y = \mu D_y / (1 - \mu^2)$, где D_x и D_y — некоторые характерные длины по осям x и y , значения которых выберем ниже. Такими преобразованиями интервалы $-\infty < x < \infty$ и $-\infty < y < \infty$ отображаются соответственно в безразмерные интервалы $-1 < \tau < 1$ и $-1 < \mu < 1$.

Уравнение (13) после такой замены примет вид

$$D_x^{-2} \frac{(1-\tau^2)^4}{(1+\tau^2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tau^2} - D_x^{-2} \frac{2\tau(1-\tau^2)^3}{(1+\tau^2)^3} (\tau^2+3) \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + D_y^{-2} \frac{(1-\mu^2)^4}{(1+\mu^2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mu^2} - D_y^{-2} \frac{2\mu(1-\mu^2)^3}{(1+\mu^2)^3} (\mu^2+3) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} + (1-\zeta)^4 D_z^{-2} \frac{d^2 \psi}{d\zeta^2} - 2(1-\zeta)^3 D_z^{-2} \frac{d\psi}{d\zeta} - \frac{2m}{\hbar^2} u(\tau, \mu, \zeta) \psi = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi, \quad (15)$$

где

$$u(\tau, \mu, \zeta) = U \left(\frac{\tau D_x}{1-\tau^2}, \frac{\mu D_y}{1-\mu^2}, \frac{\zeta D_z}{1-\zeta} \right).$$

Положим $D_z = D$. Будем далее считать, что характерные размеры задачи по осям x и y примерно одинаковы, поэтому положим $D_x = D_y = H$ (обобщение приведенных ниже вычислений на случай, когда все три характерных размера существенно различаются, тривиально).

Тогда (15) примет вид

$$\frac{D^2}{H^2} \frac{(1-\tau^2)^4}{(1+\tau^2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \tau^2} - \frac{D^2}{H^2} \frac{2\tau(1-\tau^2)^3}{(1+\tau^2)^3} (\tau^2+3) \frac{\partial \psi}{\partial \tau} + \frac{D^2}{H^2} \frac{(1-\mu^2)^4}{(1+\mu^2)^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \mu^2} - \frac{D^2}{H^2} \frac{2\mu(1-\mu^2)^3}{(1+\mu^2)^3} (\mu^2+3) \frac{\partial \psi}{\partial \mu} + (1-\zeta)^4 \frac{d^2 \psi}{d\zeta^2} - 2(1-\zeta)^3 \frac{d\psi}{d\zeta} - \frac{2mD^2}{\hbar^2} u(\tau, \mu, \zeta) \psi = -\frac{2mD^2}{\hbar^2} E \psi. \quad (16)$$

Граничные условия для ψ в безразмерных координатах принимают вид

$$\begin{aligned} \psi|_{\tau \rightarrow -1} = 0, \quad \psi|_{\tau \rightarrow +1} = 0, \\ \psi|_{\mu \rightarrow -1} = 0, \quad \psi|_{\mu \rightarrow +1} = 0, \\ \psi|_{\zeta \rightarrow 0} = 0, \quad \psi|_{\zeta \rightarrow +1} = 0. \end{aligned} \quad (17)$$

Рассмотрим конечно-разностное представление уравнения (16). Введем дискретизацию по τ_k, μ_l, ζ_n и вектор-столбец следующим образом:

$$\tau_k = 2 \left(k - \frac{M_\tau + 1}{2} \right) h_\tau \quad \text{для } k = 0, 1, 2, \dots, M_\tau + 1,$$

$$\mu_l = 2 \left(l - \frac{M_\mu + 1}{2} \right) h_\mu \quad \text{для } l = 0, 1, 2, \dots, M_\mu + 1,$$

$$\zeta_n = n h_\zeta \quad \text{для } n = 0, 1, 2, \dots, M_\zeta + 1,$$

$$\psi_{k,l,n} = \psi(\tau_k, \mu_l, \zeta_n).$$

При этом шаг дискретизации по оси τ равен $h_\tau = 1/(M_\tau + 1)$ и, в силу граничных условий (17), получим

$$\psi(\tau_0, \mu_l, \zeta_n) = \psi(\tau_{M_\tau+1}, \mu_l, \zeta_n) = 0.$$

Шаг по оси μ равен $h_\mu = 1/(M_\mu + 1)$ и, в силу (17),

$$\psi(\tau_k, \mu_0, \zeta_n) = \psi(\tau_k, \mu_{M_\mu+1}, \zeta_n) = 0.$$

Шаг по оси ζ равен $h_\zeta = 1/(M_\zeta + 1)$ и, в силу (17),

$$\psi(\tau_k, \mu_l, \zeta_0) = \psi(\tau_k, \mu_l, \zeta_{M_\zeta+1}) = 0.$$

Конечно-разностные аппроксимации первых и вторых частных производных в точке (τ_k, μ_l, ζ_n) примем в виде

$$\frac{\partial \psi}{\partial z}(\tau_k, \mu_l, \zeta_n) \approx \frac{\psi_{k,l,n+1} - \psi_{k,l,n-1}}{2h_\zeta} + O(h_\zeta^2),$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}(\tau_k, \mu_l, \zeta_n) \approx \frac{\psi_{k,l,n+1} - 2\psi_{k,l,n} + \psi_{k,l,n-1}}{h_\zeta^2} + O(h_\zeta^2).$$

Аналогично можно записать выражения для производных по другим переменным.

Подставляя приведенные выше приближенные конечно-разностные выражения в стационарное уравнение Шредингера (16), получим

$$\begin{aligned} \frac{D^2}{H^2} \left[\frac{\tau_k(1-\tau_k^2)^3(\tau_k^2+3)}{(1+\tau_k^2)^3 h_\tau} - \frac{(1-\tau_k^2)^4}{(1+\tau_k^2)^2 h_\tau^2} \right] \psi_{k+1,l,n} - \frac{D^2}{H^2} \left[\frac{(1-\tau_k^2)^4}{(1+\tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{\tau_k(1-\tau_k^2)^3(\tau_k^2+3)}{(1+\tau_k^2)^3 h_\tau} \right] \psi_{k-1,l,n} + \frac{D^2}{H^2} \left[\frac{\mu_l(1-\mu_l^2)^3(\mu_l^2+3)}{(1+\mu_l^2)^3 h_\mu} - \frac{(1-\mu_l^2)^4}{(1+\mu_l^2)^2 h_\mu^2} \right] \psi_{k,l+1,n} - \frac{D^2}{H^2} \left[\frac{(1-\mu_l^2)^4}{(1+\mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \frac{\mu_l(1-\mu_l^2)^3(\mu_l^2+3)}{(1+\mu_l^2)^3 h_\mu} \right] \psi_{k,l-1,n} + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \left[\frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} - \frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} \right] \psi_{k,l,n+1} - \\
 & - \left[\frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} \right] \psi_{k,l,n-1} + \\
 & + \left[\frac{D^2}{H^2} \frac{2(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{D^2}{H^2} \frac{2(1 - \mu_l^2)^4}{(1 + \mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \right. \\
 & \left. + \frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{2mD^2}{\hbar^2} u(\tau_k, \mu_l, \zeta_n) \right] \psi_{k,l,n} = \\
 & = \lambda \psi_{k,l,n}, \quad (18)
 \end{aligned}$$

где введено обозначение $\lambda = 2mD^2 E/\hbar^2$, а k, l и n меняются соответственно от 1 до M_τ, M_μ и M_ζ . Уравнение (18) можно представить в виде матричного уравнения на собственные значения

$$\sum_{j=1}^{M_\tau \times M_\mu \times M_\zeta} A_{ij} \Psi_j = \lambda \Psi_i,$$

где $\Psi_j = \psi_{k,l,n}$ и введена единая нумерация точек (взаимно однозначная целая функция $j = j(k, l, n)$).

Представим потенциальную энергию в виде $u(\tau, \mu, \zeta) = W(D)f(\tau, \mu, \zeta)$, где $W(D)$ — характерная энергия задачи, которая является функцией характерной длины D , а $f(\tau, \mu, \zeta)$ — безразмерная потенциальная энергия. Тогда уравнение на собственные значения примет вид

$$\begin{aligned}
 & \alpha^2 \left[\frac{\tau_k(1 - \tau_k^2)^3(\tau_k^2 + 3)}{(1 + \tau_k^2)^3 h_\tau} - \frac{(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} \right] \psi_{k+1,l,n} - \\
 & - \alpha^2 \left[\frac{(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{\tau_k(1 - \tau_k^2)^3(\tau_k^2 + 3)}{(1 + \tau_k^2)^3 h_\tau} \right] \psi_{k-1,l,n} + \\
 & + \alpha^2 \left[\frac{\mu_l(1 - \mu_l^2)^3(\mu_l^2 + 3)}{(1 + \mu_l^2)^3 h_\mu} - \frac{(1 - \mu_l^2)^4}{(1 + \mu_l^2)^2 h_\mu^2} \right] \psi_{k,l+1,n} - \\
 & - \alpha^2 \left[\frac{(1 - \mu_l^2)^4}{(1 + \mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \frac{\mu_l(1 - \mu_l^2)^3(\mu_l^2 + 3)}{(1 + \mu_l^2)^3 h_\mu} \right] \psi_{k,l-1,n} + \\
 & + \left[\frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} - \frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} \right] \psi_{k,l,n+1} - \\
 & - \left[\frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} \right] \psi_{k,l,n-1} + \\
 & + \left[\alpha^2 \frac{2(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \alpha^2 \frac{2(1 - \mu_l^2)^4}{(1 + \mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \right. \\
 & \left. + \frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{2mD^2 W(D)}{\hbar^2} f(\tau_k, \mu_l, \zeta_n) \right] \psi_{k,l,n} = \\
 & = \lambda \psi_{k,l,n}, \quad (19)
 \end{aligned}$$

где $\alpha^2 = D^2/H^2$. Как мы увидим ниже, для широкого класса задач $\alpha \ll 1$.

Уравнение (19) допускает выбор произвольных характерных длин D и H . Выберем величину D таким же образом, как это было сделано в работе [16], чтобы выполнялось соотношение $2mD^2 W(D)/\hbar^2 = 1$. Из полученного уравнения находим значение D , после этого подставляем его в выражение для λ и находим, что $\lambda = 2mD^2 E/\hbar^2$ — энергия, выраженная в единицах характерной энергии задачи W . Опыт численного моделирования показал, что при указанном выборе соотношения между D и W матрица задачи оказывается хорошо обусловленной и стандартные алгоритмы нахождения собственных значений работают устойчиво. Величину H выберем равной характерной длине адресного электрода (в частном случае квадратного электрода со стороной a положительной $H = a$).

Запишем теперь в переменных τ, μ, ζ выражение (12) для потенциальной энергии электрона вблизи диэлектрической пленки, расположенной над адресными электродами. Потенциальная энергия электрона после замены переменных и несложных преобразований примет вид

$$\begin{aligned}
 u(\tau, \mu, \zeta) = & -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} \frac{1 - \zeta}{\zeta} \times \\
 & \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta)}{\varepsilon + \text{th}(\delta(1 - \zeta)\vartheta/2\zeta)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \\
 & - \frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 D} \frac{\varepsilon}{\pi^2} v \int_{-\infty}^\infty d\theta \int_{-\infty}^\infty d\sigma \frac{\sin(\rho\theta/2) \sin(\rho\sigma/2)}{\theta\sigma} \times \\
 & \times \frac{\exp\left(i \frac{\rho\tau\theta}{1 - \tau^2} + i \frac{\rho\mu\sigma}{1 - \mu^2} - \frac{\zeta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2}}{1 - \zeta}\right)}{\varepsilon \text{ch}(\delta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2}) + \text{sh}(\delta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2})}.
 \end{aligned}$$

Здесь $\delta = b/D$ — толщина пленки, выраженная в единицах характерной длины D , $\rho = a/D = \alpha^{-1}$ — размер квадратного электрода, выраженный в единицах характерной длины D , $v = V/\varphi_0$ — потенциал электрода, выраженный в единицах характерного потенциала $\varphi_0 = e/16\pi\epsilon_0 D$.

Полученное выражение можно представить в виде

$$u(\tau, \mu, \zeta) = W(D)f(v, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \mu, \zeta),$$

где $W(D) = e^2/16\pi\epsilon_0 D$ — характерная энергия задачи, а функция $f(v, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \mu, \zeta)$ имеет вид

$$f(v, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \mu, \zeta) = -\frac{1-\zeta}{\zeta} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)}{\varepsilon + \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{\varepsilon}{\pi^2} v \int_{-\infty}^\infty d\theta \times \\ \times \int_{-\infty}^\infty d\sigma \frac{\sin(\rho\theta/2) \sin(\rho\sigma/2)}{\theta\sigma [\varepsilon \text{ch}(\delta\sqrt{\theta^2+\sigma^2}) + \text{sh}(\delta\sqrt{\theta^2+\sigma^2})]} \times \\ \times \exp\left(i\frac{\rho\tau\theta}{1-\tau^2} + i\frac{\rho\mu\sigma}{1-\mu^2} - \frac{\zeta\sqrt{\theta^2+\sigma^2}}{1-\zeta}\right).$$

Ранее мы положили, что $2mD^2W(D)/\hbar^2 = 1$, поэтому характерные длина D , энергия W , потенциал φ_0 и электрическое поле $\mathfrak{E} = \varphi_0/D$ для данной задачи равны

$$D = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{16\pi\varepsilon_0}{e^2} = \frac{8\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2} = 2a_B \approx 1.0584 \cdot 10^{-10} \text{ м}, \\ W = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 D} = \frac{e^2}{32\pi\varepsilon_0 a_B} \approx 3.4014 \text{ эВ}, \\ \varphi_0 = \frac{e}{16\pi\varepsilon_0 D} = \frac{e}{32\pi\varepsilon_0 a_B} \approx 3.4014 \text{ В}, \\ \mathfrak{E} = \frac{\varphi_0}{D} = \frac{e}{16\pi\varepsilon_0 D^2} = \frac{e}{64\pi\varepsilon_0 a_B^2} \approx 3.214 \cdot 10^{10} \text{ В/м},$$

где a_B — боровский радиус электрона. Заметим, что такие характерные длина и энергия с точностью до двойки эквивалентны кулоновым единицам, принятым при рассмотрении движения в кулоновом поле (см. [21], § 36).

В результате уравнение для собственных значений уровней энергии в безразмерном виде запишется как

$$\alpha^2 \left[\frac{\tau_k(1-\tau_k^2)^3(\tau_k^2+3)}{(1+\tau_k^2)^3 h_\tau} - \frac{(1-\tau_k^2)^4}{(1+\tau_k^2)^2 h_\tau^2} \right] \psi_{k+1,l,n} - \\ - \alpha^2 \left[\frac{(1-\tau_k^2)^4}{(1+\tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{\tau_k(1-\tau_k^2)^3(\tau_k^2+3)}{(1+\tau_k^2)^3 h_\tau} \right] \psi_{k-1,l,n} + \\ + \alpha^2 \left[\frac{\mu_l(1-\mu_l^2)^3(\mu_l^2+3)}{(1+\mu_l^2)^3 h_\mu} - \frac{(1-\mu_l^2)^4}{(1+\mu_l^2)^2 h_\mu^2} \right] \psi_{k,l+1,n} - \\ - \alpha^2 \left[\frac{(1-\mu_l^2)^4}{(1+\mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \frac{\mu_l(1-\mu_l^2)^3(\mu_l^2+3)}{(1+\mu_l^2)^3 h_\mu} \right] \psi_{k,l-1,n} + \\ + \left[\frac{(1-\zeta_n)^3}{h_\zeta} - \frac{(1-\zeta_n)^4}{h_\zeta^2} \right] \psi_{k,l,n+1} - \\ - \left[\frac{(1-\zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{(1-\zeta_n)^3}{h_\zeta} \right] \psi_{k,l,n-1} + \\ + \left[\alpha^2 \frac{2(1-\tau_k^2)^4}{(1+\tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \alpha^2 \frac{2(1-\mu_l^2)^4}{(1+\mu_l^2)^2 h_\mu^2} + \right.$$

$$\left. + \frac{2(1-\zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + f(v, \rho, \delta, \varepsilon, \tau_k, \mu_l, \zeta_n) \right] \psi_{k,l,n} = \\ = \lambda \psi_{k,l,n}. \quad (20)$$

Представляя уравнение (20) в матричном виде и решая матричную задачу на собственные значения с помощью стандартных процедур, найдем собственные значения λ_i и после этого размерные значения собственной энергии электрона по формуле

$$E_i = \frac{\hbar^2}{2mD^2} \lambda_i = \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 D} \lambda_i = W \lambda_i.$$

Нетрудно обобщить полученное решение для случая, когда на систему наложено прижимающее электроны однородное электрическое поле, параллельное оси z , с составляющей $E_z = E_0$ снаружи пленки. Предполагается, что это поле создается заряженной пластиной, расположенной в свободном пространстве параллельно поверхности пленки, которая составляет вместе с системой адресных электродов под пленкой плоский конденсатор. В этом случае выражение (12) для потенциальной энергии электрона снаружи пленки примет вид

$$U(x, y, z) = e \left(\frac{E_0}{\varepsilon} b + E_0 z \right) - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 z} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(b\vartheta/2z)}{\varepsilon + \text{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{e\varepsilon V}{\pi^2} \times \\ \times \int_{-\infty}^\infty d\xi \int_{-\infty}^\infty d\eta \frac{\sin(a\xi/2) \sin(a\eta/2)}{\xi\eta} \times \\ \times \frac{e^{i\xi x + i\eta y - \beta z}}{\varepsilon \text{ch}(\beta b) + \text{sh}(\beta b)}. \quad (21)$$

Потенциальная энергия электрона после ранее описанной замены переменных и несложных преобразований примет вид

$$u(\tau, \mu, \zeta) = eE_0 D \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\zeta}{1-\zeta} \right) - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 D} \frac{1-\zeta}{\zeta} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)}{\varepsilon + \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \\ - \frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 D} \frac{\varepsilon}{\pi^2} v \int_{-\infty}^\infty d\theta \int_{-\infty}^\infty d\sigma \frac{\sin(\rho\theta/2) \sin(\rho\sigma/2)}{\theta\sigma} \times \\ \times \frac{\exp\left(i\frac{\rho\tau\theta}{1-\tau^2} + i\frac{\rho\mu\sigma}{1-\mu^2} - \frac{\zeta\sqrt{\theta^2+\sigma^2}}{1-\zeta}\right)}{\varepsilon \text{ch}(\delta\sqrt{\theta^2+\sigma^2}) + \text{sh}(\delta\sqrt{\theta^2+\sigma^2})}.$$

Полученное выражение можно, как и ранее, представить в виде

$$u(\tau, \mu, \zeta) = W(D)f(\chi, \nu, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \mu, \zeta),$$

где, как и ранее, $W(D) = e^2/16\pi\varepsilon_0 D$ и

$$f(\chi, \nu, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \mu, \zeta) = \chi \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\zeta}{1-\zeta} \right) - \frac{1-\zeta}{\zeta} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)}{\varepsilon + \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{\varepsilon}{\pi^2} \nu \int_{-\infty}^\infty d\theta \int_{-\infty}^\infty d\sigma \times \\ \times \frac{\sin(\rho\theta/2) \sin(\rho\sigma/2)}{\theta\sigma [\varepsilon \text{ch}(\delta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2}) + \text{sh}(\delta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2})]} \times \\ \times \exp \left(i \frac{\rho\tau\theta}{1-\tau^2} + i \frac{\rho\mu\sigma}{1-\mu^2} - \frac{\zeta\sqrt{\theta^2 + \sigma^2}}{1-\zeta} \right). \quad (22)$$

Заметим, что влияние внешнего электрического поля E_0 определяется безразмерной величиной

$$\chi = \frac{eE_0 D}{W(D)} = \frac{16\pi\varepsilon_0 E_0 D^2}{e} = \frac{E_0}{\mathfrak{E}},$$

которая есть внешнее поле, выраженное в единицах характерного поля задачи.

Конечно-разностное представление стационарного уравнения Шредингера в безразмерном виде при наличии внешнего электрического поля отличается от уравнения (20) только тем, что функция f выражается формулой (22).

5. ЧАСТНЫЙ ДВУМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ: АКТИВНАЯ ПОЛОСА — АДРЕСНЫЙ ЭЛЕКТРОД

Рассмотрим частный случай, когда адресным электродом является металлическая эквипотенциальная бесконечная полоса в направлении оси y . Предположим, что потенциал всей плоскости адресного электрода $z = -b$ равен нулю, за исключением указанной металлической полосы электрода шириной a (ширина в направлении оси x) с центром на оси z . Потенциал полосы равен V . Фурье-образ такого потенциала есть

$$\tilde{\varphi}_a(\xi, \eta) = \int_{-a/2}^{a/2} dx \int_{-\infty}^\infty dy e^{-i\xi x - i\eta y} V = \\ = \frac{4\pi V}{\xi} \sin \frac{a\xi}{2} \delta(\eta).$$

Действительно, имеем тождество

$$1 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\eta e^{i\eta y} 2\pi\delta(\eta),$$

а, значит, фурье-образ единицы есть

$$2\pi\delta(\eta) = \int_{-\infty}^\infty e^{i\eta y} dy.$$

Подставляя это соотношение в (11), получим следующее выражение для потенциальной энергии электрона в полученной двумерной потенциальной яме над поверхностью инертной пленки над активным электродом в виде полосы с потенциалом V :

$$U(x, y, z) = U_0(z) + U_e(x, y, z) = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 z} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(b\vartheta/2z)}{\varepsilon + \text{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{e\varepsilon V}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\xi \times \\ \times \int_{-\infty}^\infty \frac{\sin(a\xi/2)}{\xi} d\eta \frac{e^{i\xi x + i\eta y - \sqrt{\xi^2 + \eta^2} z} \delta(\eta)}{\varepsilon \text{ch}(b\sqrt{\xi^2 + \eta^2}) + \text{sh}(b\sqrt{\xi^2 + \eta^2})},$$

или

$$U(x, y, z) = U_0(z) + U_e(x, y, z) = -\frac{e^2}{16\pi\varepsilon_0 z} \times \\ \times \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(b\vartheta/2z)}{\varepsilon + \text{th}(b\vartheta/2z)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \frac{e\varepsilon V}{\pi} \int_{-\infty}^\infty d\xi \times \\ \times \frac{\sin(a\xi/2)}{\xi} \frac{e^{i\xi x - \sqrt{\xi^2} z}}{\varepsilon \text{ch}(b\sqrt{\xi^2}) + \text{sh}(b\sqrt{\xi^2})}. \quad (23)$$

Если учесть прижимающее поле и записать выражение для потенциальной энергии в безразмерном виде, то получим

$$f(\chi, \nu, \rho, \delta, \varepsilon, \tau, \zeta) = \chi \left(\frac{\delta}{\varepsilon} + \frac{\zeta}{1-\zeta} \right) - \\ - \frac{1-\zeta}{\zeta} \int_0^\infty \frac{\varepsilon - \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)}{\varepsilon + \text{th}(\delta(1-\zeta)\vartheta/2\zeta)} e^{-\vartheta} d\vartheta - \\ - \frac{\varepsilon}{\pi} \nu \int_{-\infty}^\infty d\theta \frac{\sin(\rho\theta/2)}{\theta [\varepsilon \text{ch}(\delta\sqrt{\theta^2}) + \text{sh}(\delta\sqrt{\theta^2})]} \times \\ \times \exp \left(i \frac{\rho\tau\theta}{1-\tau^2} - \frac{\zeta\sqrt{\theta^2}}{1-\zeta} \right). \quad (24)$$

Уравнение на собственные значения для адресной полосы (для двумерного случая, аналогичное уравнению (20) для трехмерного случая) запишется в виде

$$\begin{aligned} & \alpha^2 \left[\frac{\tau_k (1 - \tau_k^2)^3 (\tau_k^2 + 3)}{(1 + \tau_k^2)^3 h_\tau} - \frac{(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} \right] \psi_{k+1,n} - \\ & - \alpha^2 \left[\frac{(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{\tau_k (1 - \tau_k^2)^3 (\tau_k^2 + 3)}{(1 + \tau_k^2)^3 h_\tau} \right] \psi_{k-1,n} + \\ & + \left[\frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} - \frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} \right] \psi_{k,n+1} - \\ & - \left[\frac{(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \frac{(1 - \zeta_n)^3}{h_\zeta} \right] \psi_{k,n-1} + \\ & + \left[\alpha^2 \frac{2(1 - \tau_k^2)^4}{(1 + \tau_k^2)^2 h_\tau^2} + \frac{2(1 - \zeta_n)^4}{h_\zeta^2} + \right. \\ & \left. + f(v, \rho, \delta, \varepsilon, \tau_k, \zeta_n) \right] \psi_{k,n} = \lambda \psi_{k,n}. \quad (25) \end{aligned}$$

6. РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Сначала сделаем несколько замечаний о структуре энергетического спектра электрона, находящегося у поверхности инертной пленки.

В случае, когда электрон находится у поверхности инертной пленки бесконечной толщины, задача нахождения спектра легко решается [2]. У этой задачи имеется выделенное направление, перпендикулярное поверхности (ось z). Поэтому в уравнении Шредингера на собственные значения переменные разделяются, и полученный в результате решения уравнения спектр электрона состоит из двух слагаемых. Одно слагаемое описывает непрерывный спектр, связанный с движением электрона параллельно поверхности жидкости, второе слагаемое описывает дискретный спектр связанных по z состояний:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + \frac{mQ^2}{2\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, \dots,$$

где \mathbf{k} — двумерный волновой вектор, параллельный поверхности, $Q = (\varepsilon - 1)/4(\varepsilon + 1)$, ε — диэлектрическая проницаемость пленки, m — масса электрона, e — элементарный заряд.

Когда толщина инертной пленки становится конечной, а под пленкой расположен заземленный проводящий бесконечный (в плоскости, перпендикулярной пленке) плоский электрод, то дискретная часть спектра меняется из-за изменения потенциальной энергии электрона [16]. Однако качественно спектр электрона остается прежним:

$$E_n(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} + E(n), \quad n = 1, 2, \dots$$

Если теперь под пленкой поместить проводящий электрод в виде полосы, бесконечной вдоль оси y , и подать на него положительный потенциал, то возникнет двумерная потенциальная яма в плоскости xz и электрон при некоторых энергиях будет локализован и в направлении оси x . В таких связанных (в пространстве xz) состояниях спектр электрона будет иметь вид

$$E_{n,l}(k_y) = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + E(n, l), \quad n, l = 1, 2, \dots,$$

где k_y — волновое число в направлении оси y (вдоль направления адресной полосы), $E(n, l)$ — дискретная часть спектра, зависящая от напряжения на электроде V . Мы видим, что наложение притягивающего электрон напряжения снимает вырождение уровней дискретной части спектра, соответствующее координате x . Очевидно, что при переходе к полностью трехмерной потенциальной яме (для трехмерной задачи расчеты требуют значительно больших вычислительных ресурсов и не были проведены в настоящей работе), которую образует, например, адресный квадратный электрод (см. разд. 3), спектр связанных состояний будет полностью дискретным.

Численные расчеты для адресного электрода в виде полосы (для двумерной задачи) были проведены для электрона у поверхности пленки жидкого гелия ^4He . Диэлектрическая проницаемость принималась равной $\varepsilon = 1.057$, толщина пленки — равной $b = 100$ нм. Под пленкой располагался плоский проводящий заземленный электрод с вырезом для активного адресного электрода в виде металлической полосы (см. разд. 5). Потенциал адресного электрода определял глубину потенциальной ямы у поверхности пленки. Таким образом, под действием электрического поля электрода электрон удерживался вблизи адресного электрода над поверхностью пленки. Ширина полосы адресного электрода была равна $a = 100$ нм.

Расчеты показали, что при подаче положительного потенциала на электрод дискретные уровни энергии, связанные с локализацией электрона в направлении оси z , расщепляются на бесконечное число уровней в связи с локализацией электрона в направлении оси x . На рис. 4 сплошными линиями показаны шесть нижних уровней (из бесконечного числа), на которые расщепляется самый нижний уровень энергии одномерной задачи (когда потенциал рассматриваемого электрода равен нулю), который показан пунктирной линией.

На рис. 5 и 6 показаны аналогичные зависимости

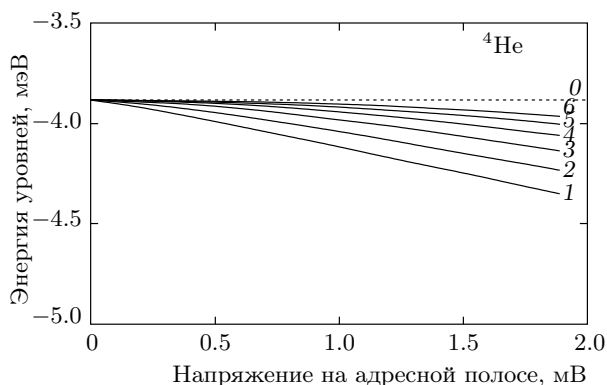


Рис. 4. Зависимости от напряжения на адресном электроде энергий шести нижних уровней (сплошные линии 1–6) из бесконечного числа, на которые расщепляется самый нижний уровень энергии 0 одномерной задачи (пунктирная линия). Одномерная задача соответствует случаю, когда потенциал адресного электрода равен нулю. Расчеты проведены для пленки жидкого ${}^4\text{He}$ толщиной $b = 100$ нм. Ширина адресного электрода $a = 100$ нм

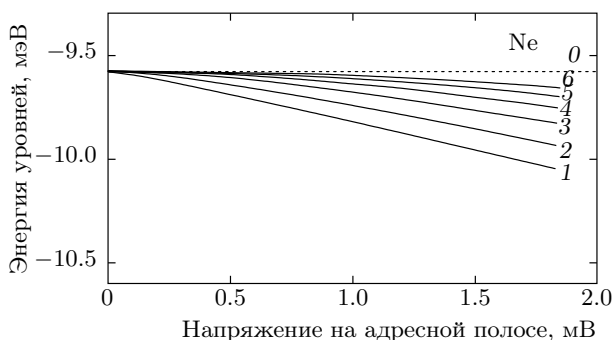


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для пленки твердого Ne

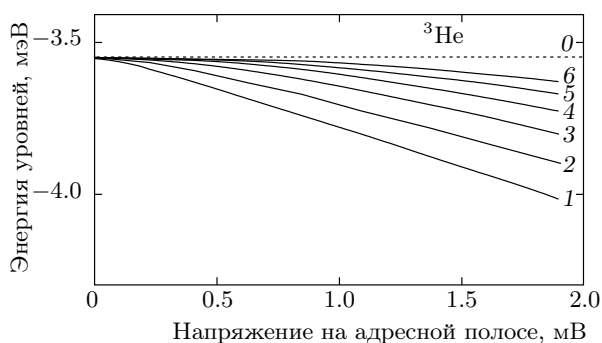


Рис. 6. То же, что на рис. 4, для пленки жидкого ${}^3\text{He}$

для пленки твердого неона и ${}^3\text{He}$, диэлектрические проницаемости которых принимались равными соответственно $\varepsilon = 1.188$ и $\varepsilon = 1.0428$ [22].

Результаты расчетов расщепления уровней качественно совпадают с результатами работы [17], в которой расщепление вычислено в приближении разделения движения электрона в плоскости поверхности пленки (в этой плоскости в [17] движение сводится к гармоническому осцилляторному движению) и перпендикулярно ей. С увеличением потенциала адресного электрода уровни смещаются и расщепляются. Поскольку в работе [17] расчеты проводились для другой геометрии, количественное сравнение не представляется возможным.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проведен теоретический анализ энергетического спектра электронов, локализованных над поверхностью пленок жидких ${}^3\text{He}$, ${}^4\text{He}$ и твердого Ne под действием сил электростатического притяжения индуцированных зарядов и прижимающего поля адресного электрода. Показано, что при подаче положительного потенциала на электрод дискретные уровни энергии, связанные с локализацией электрона в направлении оси z , расщепляются на бесконечное число уровней в связи с локализацией электрона в направлении оси x . Количественно найдена структура уровней и зависимость расщепления уровней от приложенного напряжения для адресного электрода в виде проводящей полосы.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. W. Cole, Phys. Rev. B **2**, 4239 (1970).
2. M. W. Cole, Rev. Mod. Phys. **46**, 451 (1974).
3. В. Б. Шикин, Ю. П. Монарха, *Двумерные заряженные системы в гелии*, Наука, Москва (1989).
4. П. Д. Григорьев, Письма в ЖЭТФ **66**, 599 (1997).
5. П. Д. Григорьев, А. М. Дюгаев, ЖЭТФ **120**, 119 (2001).
6. А. П. Володин, В. С. Эдельман, Письма в ЖЭТФ **30**, 668 (1979).
7. C. C. Grimes and T. R. Brown, Phys. Rev. Lett. **32**, 280 (1974).
8. C. C. Grimes, T. R. Brown, M. L. Burns, and C. L. Zipfel, Phys. Rev. B **13**, 140 (1976).

9. А. М. Трояновский, А. П. Володин, М. С. Хайкин, Письма в ЖЭТФ **29**, 421 (1979).
10. А. М. Трояновский, М. С. Хайкин, ЖЭТФ **81**, 398 (1981).
11. A. G. Khrapak, W. F. Schmidt, and E. Illenberger, in *Electronic Excitations in Liquefied Rare Gases*, ed. by W. F. Schmidt and E. Illenberger, Amer. Sci. Publ. (2005), p. 239.
12. I. I. Smolyaninov, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 2075 (2001).
13. I. I. Smolyaninov, Phys. Rev. Lett. **85**, 2861 (2000).
14. P. M. Plazman and M. I. Dykman, Science **284**, 1967 (1999).
15. A. J. Dahm, J. M. Goodkind, I. Karakurt, and S. Pilla, J. Low Temp. Phys. **126**, 709 (2002).
16. А. Б. Петрин, ЖЭТФ **135**, 330 (2009).
17. M. I. Dykman, P. M. Plazman, and P. Sedighrad, Phys. Rev. B **67**, 155402 (2003).
18. A. Sommerfeld, Ann. Physik. (Leipzig) **81**, 1135 (1926).
19. А. Б. Петрин, ЖЭТФ **134**, 436 (2008).
20. M. S. Stern and A. E. A. Warburton, J. Phys. A: Gen. Phys. **5**, 112 (1972).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Наука, Москва (1989).
22. H. A. Krierstead, J. Low Temp. Phys. **24**, 497 (1976).