

УДК 538.91.911  
© 1990

## ЭФФЕКТЫ ЛОКАЛЬНОГО ПОЛЯ В ЭКРАНИРОВАНИИ ЗАРЯЖЕННОЙ ПРИМЕСИ КВАЗИДВУМЕРНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИМ ЭЛЕКТРОННЫМ ГАЗОМ

С. В. Ивлиев, В. Н. Собакин

Рассмотрено влияние обменно-корреляционных эффектов во взаимодействии между электронами в квазидвумерном электронном газе на радиус экранирования заряженной примеси. Сформулирована формально точная система уравнений, позволяющая получить функцию диэлектрической проницаемости взаимодействующего электронного газа и проанализировать ее поведение в области промежуточных плотностей, где еще не происходит фазовых превращений. Получено и решено самосогласованное уравнение для параметра экранирования межэлектронного взаимодействия. Исследована зависимость радиуса экранирования заряженной примеси от электронной плотности. Качественно рассмотрено влияние конечности толщины электронного слоя на исследуемые характеристики.

1. Исследование свойств электронов в тонких проводящих слоях в системах с пониженной размерностью, как, например, гетеропереходы, МДП-структуры или сверхрешетки, является принципиальным для изучения параметров устройств и приборов на основе таких структур. В этих микроструктурах скачки потенциала и электронного поля пространственного заряда приводят к квантованию движения электронов в перпендикулярном границам раздела направлении и к возникновению дискретного спектра. В самой плоскости раздела электроны могут двигаться свободно и каждый из дискретных уровней образует квазидвумерную подзону. Движение электронов в подзоне при низких температурах имеет много общего со свойствами гипотетического чисто двумерного электронного газа [1]. При этом одной из важнейших характеристик для прикладных целей является подвижность электронов. Подвижность определяется релаксацией волнового вектора при рассеянии электронов в основном на кулоновском потенциале ионизованных примесей. Экранирование таких примесей взаимодействующим электронным газом при плотностях, характерных для типичных квазидвумерных структур, в значительной мере будет определяться эффектами обмена и корреляции в межчастичном взаимодействии, т. е. неидеальностью системы электронов. Поэтому анализ характера экранирования таких примесей при учете обменно-корреляционных эффектов представляет актуальную задачу. Степень неидеальности системы электронов принято характеризовать безразмерным параметром  $r_s$ , определенным соотношением  $N_s = \pi a_s^2 r_s^2$ , где  $N_s$  — концентрация двумерных электронов,  $a_s^*$  — эффективный боровский радиус. Для типичных гетеропереходов значения  $r_s \leq 1$ , в кремниевых МОП-структурах  $r_s \sim 0.1 \div 20$ .

В настоящей работе рассматривается поведение функции диэлектрической проницаемости взаимодействующего двумерного электронного газа в промежуточной области плотностей  $r_s \leq 10$ , когда еще не происходит структурных фазовых переходов в спин-поляризованное состояние или состояние с волной зарядовой плотности. Оценки соответствующих крити-

ческих значений  $r_i$  приведены, например, в [2]. Функция диэлектрической проницаемости содержит практически всю информацию о характере экранирования кулоновских потенциалов, в частности определяет радиус экранирования заряженной примеси [1], а также вид межчастичного потенциала при образовании поверхностных экситонов [3]. Последовательно учитываются эффекты обменно-корреляционного взаимодействия электронов между собой, приводящие к значительному изменению радиуса экранирования в рассматриваемой области электронных плотностей.

2. Пространственно-однородная система взаимодействующих двумерных электронов на компенсирующем положительном фоне описывается функцией Грина электронов  $G(x_1, x_2)$ , вершинной функцией электрон-электронного взаимодействия  $\Gamma(x_1, x_2, x_3)$ , потенциалом такого взаимодействия  $v(r_1 - r_2)$ , экранируемым диэлектрической проницаемостью  $\epsilon(x_1, x_2)$ . В импульсном представлении перечисленные характеристики связаны системой уравнений [4, 5]

$$G^{-1}(k) = \left( \omega - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + i\delta \operatorname{sgn}(|k| - k_F) \right)^{-1} - \Sigma(k), \quad (1)$$

$$\Sigma(k) = i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} G(k+p) W(p) \Gamma(k, p), \quad (2)$$

$$W(k) = v(k) \epsilon^{-1}(k) = 2\pi e^2 / |k| \epsilon(k), \quad (3)$$

$$\epsilon(k) = 1 + v(k) \Pi(k), \quad (4)$$

$$\Pi(k) = i \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} G(p) G(p+k) \Gamma(p, k), \quad (5)$$

$$\Gamma(p, q) = 1 + i \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} G(p+k) G(p+k+q) W(k) \Gamma(p, k) \Gamma(k, q). \quad (6)$$

Здесь  $\Sigma(k)$  — электронная собственно-энергетическая часть,  $W(k)$  — экранированный кулоновский потенциал,  $\Pi(k)$  — поляризационный оператор,  $p \equiv (\omega, \mathbf{p})$ . Последнее уравнение записано фактически в первом порядке по параметру  $\tilde{W}(p, q) = W(q) \Gamma(p, q)$ , который можно рассматривать как эффективный потенциал межчастичного взаимодействия. Использование именно такой формы уравнений предполагает, во-первых, что электронная система сохраняет свою однородность и далека от точек структурных переходов. Во-вторых, использование линейного по  $\tilde{W}$  приближения подразумевает формальную малость этой величины в рассматриваемом интервале плотностей. Кроме того, как можно показать, члены следующие порядков по  $\tilde{W}$  в значительной степени компенсируют друг друга, так что такое приближение учитывает основной вклад в вершину при короткодействии эффективного потенциала.

Полагая, что вершинная функция зависит лишь от передаваемого импульса, что эквивалентно использованию формализма поправки на локальное поле, запишем уравнение (6) в виде

$$\Gamma^{-1}(q) = 1 - v(q) F(q) \Pi_0(q), \quad (7)$$

$$F(q) = \frac{1}{v(q) \Pi_0^2(q)} \int \frac{d^2 p d^2 k}{(2\pi)^4} \times \\ \times \frac{(n_p - n_{p+q})(n_k - n_{k+q})}{(\omega + E_p - E_{p+q} + i\delta)(\omega + E_k - E_{k+q} + i\delta)} \tilde{W}(p - k, E_p - E_k), \quad (8)$$

где  $F(q)$  — соответствующая функция поправки на локальное поле. Здесь  $n_p$  — числа заполнения;  $E_p$  — одночастичная энергия, определяемая из (1). Величина  $\tilde{W}$  в этом приближении оказывается локальной и вновь учтен в  $F(q)$  лишь линейный по  $\tilde{W}$  член.

Выражение для эффективного потенциала 'взаимодействия с использованием поправки на локальное поле имеет вид

$$\tilde{W}(\mathbf{p} - \mathbf{k}, E_p - E_k) = v(\mathbf{p} - \mathbf{k}) (1 + v(\mathbf{p} - \mathbf{k}) F(\mathbf{p} - \mathbf{k}, E_p - E_k) \Pi_0(\mathbf{p} - \mathbf{k}, E_p - E_k))^{-1}. \quad (9)$$

В длинноволновом пределе, используя это соотношение, получаем

$$\tilde{W}(q) \approx 2\pi e^2 / (|\mathbf{q}| + k_F \lambda), \quad (10)$$

где возникает безразмерный параметр экранирования межчастичного взаимодействия  $\lambda = (2\pi e^2 / k_F) \Pi_0(q \rightarrow 0, 0)$ . Для системы вырожденных электронов основной вклад во все процессы вносят переходы вблизи поверхности Ферми, так что характерные  $k, p \sim k_F$ , а  $E_p - E_k \approx 0$ , и, следовательно, можно использовать статический предел для  $W(q)$ . Кроме того, статический поляризационный оператор двумерных электронов практически постоянен для  $g < 2k_F$  [1], а поправка на локальное поле  $F(q) \sim q$  (8). В таком подходе функциональное поведение  $\tilde{W}(q)$  оказывается таким же, как и в длинноволновом пределе (10). Поэтому именно это выражение и будет использоваться в дальнейшем. После вычисления одночастичных энергий и длинноволнового предела для  $\Pi_0(q)$  получаем самосогласованное уравнение для параметра  $\lambda$

$$\lambda = \sqrt{2} r_s \left( 1 + \frac{\sqrt{2} r_s}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\cos \varphi}{\sqrt{2 - 2 \cos \varphi + \lambda}} \right)^{-1}. \quad (11)$$

Прямым вычислением легко показать, что как для  $r_s \ll 1$ , так и для  $r_s \gg 1$

$$\lambda = r_s \sqrt{2}, \quad (12)$$

что совпадает со значением, получаемым в приближении хаотических фаз. Отметим, что аналогичное совпадение имеет место и в трехмерном случае [5, 6]. В промежуточной области  $r_s \sim 1$  отличие  $\lambda$  от этого выражения не превышает 10 %.

3. Проанализируем характер изменения функции поправки на локальное поле в зависимости от параметров задачи. В стандартном подходе [7] диэлектрическая проницаемость записывается через хорошо известную восприимчивость  $\chi_0(q)$  свободных электронов, так что переопределим функцию поправки на локальное поле следующим образом:

$$\epsilon(q) = 1 + \frac{v \Pi_0}{1 - F v \Pi_0} = 1 - \frac{v \chi_0}{1 + G v \chi_0}, \quad (13)$$

где в линейном по  $\tilde{W}(q)$  приближении

$$G(q) = \frac{1}{v(q) \chi_0^2(q)} \int \frac{d^2 p d^2 k}{(2\pi)^4} \frac{(\theta_p - \theta_{p+q})(\theta_k - \theta_{k+q})}{\omega + \epsilon_p - \epsilon_p + i\delta} \times \\ \times \frac{2\pi e^2}{|\mathbf{p} - \mathbf{k}| + k_F \lambda} \left( \frac{1}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i\delta} - \frac{1}{\omega + \epsilon_p - \epsilon_{p+q} + i\delta} \right). \quad (14)$$

Здесь  $\theta_p$  — ступенчатая функция,  $\epsilon_k = \epsilon_k^0 = \hbar^2 k^2 / 2m$ . Введенная таким образом функция  $G(q)$  часто также называется поправкой на локальное поле (см. [7]).

1) Рассмотрим предел  $\omega = 0, q \rightarrow 0$ . Проводя соответствующие вычисления, получаем

$$G(q \rightarrow 0, 0) = \frac{1}{\pi} \frac{q}{k_F} I\left(\frac{r_s}{\sqrt{2}}\right), \quad (15)$$

где

$$I(a) = \begin{cases} 1 - \frac{\pi}{2} a + \frac{a^2}{\sqrt{1-a^2}} \ln \left( \frac{1 + \sqrt{1-a^2}}{a} \right), & a \leq 1, \\ 1 - \frac{\pi}{2} a + \frac{a^2}{\sqrt{a^2-1}} \arccos \left( \frac{1}{a} \right), & a > 1. \end{cases} \quad (16)$$

Используя явное выражение для диэлектрической проницаемости (13), находим

$$\varepsilon(q \rightarrow 0, 0) = 1 + \frac{k_F}{q} \frac{\sqrt{2} r_s}{\left(1 - \frac{\sqrt{2}}{\pi} r_s I\left(\frac{r_s}{\sqrt{2}}\right)\right)}. \quad (17)$$

Тогда для радиуса экранирования заряженной примеси получаем

$$r_{\text{экp}} \sim a_* \left(1 - \frac{\sqrt{2}}{\pi} r_s I\left(\frac{r_s}{\sqrt{2}}\right)\right). \quad (18)$$

Отметим, что в отличие от приближения хаотических фаз, где  $r_{\text{экp}} \sim a_0$  и не зависит от плотности, полученный радиус экранирования уменьшается с ростом  $r_s$ , причем при  $r_s \gg 1$   $r_{\text{экp}} \approx 1/2 r_{\text{экp}}^{(\text{RPA})}$ . Длинноволновой предел диэлектрической проницаемости также связан со сжимаемостью взаимодействующего электронного газа  $\chi$

$$\varepsilon(q \rightarrow 0, 0) = 1 + \frac{q_{TF} \chi}{q \chi_f}, \quad (19)$$

где  $\chi_f$  — сжимаемость газа свободных электронов. Сравнивая (17) и (19), находим

$$\frac{\chi_f}{\chi} = 1 - \frac{\sqrt{2}}{\pi} r_s I\left(\frac{r_s}{\sqrt{2}}\right).$$

Эта величина остается положительно определенной во всей области изменения  $r_s$ . Таким образом, учет эффектов экранирования для межчастичного потенциала вообще не приводит к проблеме отрицательной сжимаемости или обращения в нуль радиуса экранирования [7], что позволяет использовать полученные результаты при практических расчетах и в области  $r_s > 1$ .

2)  $\omega=0$ ,  $q \rightarrow \infty$ . Прямым вычислением из (14) находим

$$\lim_{q \rightarrow \infty} G(q, 0) = \frac{1}{2}. \quad (21)$$

Самое примечательное, что полученное значение вообще не зависит от  $r_s$  и поэтому справедливо в широком интервале плотностей. Это также согласуется и с точным результатом [8], где исследована связь функции парных корреляций на малых расстояниях с коротковолновым пределом для поправки на локальное поле.

3)  $\omega=0$ , произвольные волновые векторы. В этом случае возможно лишь численное нахождение величины  $G(q, 0)$ . Результаты расчетов для различных  $r_s$  представлены на рис. 1. Отметим, что характерный пик функции  $G(q, 0)$  при  $q \approx 2k_F$  отчетливо проявляется лишь при малых  $r_s$ , а для  $r_s > 2$  практически исчезает. При этом в области  $q \ll 2k_F$  поведение  $G(q, 0)$  почти линейное по  $q$ .

4) Полученные выше результаты относились к чисто модельной системе строго двумерных электронов. В реальной ситуации в проводящих слоях МДП-структур или гетеропереходов электроны, помимо чисто кулоновского межчастичного взаимодействия, испытывают еще воздействие сил изображения в полупроводнике и, кроме того, существенную роль играет конечность толщины самого слоя. Для этого случая будем считать, что электроны заполняют лишь одну размерную подзону, которой соответствует обычная вариационная волновая функция [1]

$$\Psi(z) = \frac{b^{3/2}}{\sqrt{2}} z \exp\left(-\frac{bz}{2}\right), \quad (22)$$

характеризующая распределение электронной плотности по толщине слоя. Тогда вместо кулоновского потенциала  $v(q)$  возникает перенормированное взаимодействие  $v(q) \Phi(q)$ , где

$$\Phi(q) = \frac{1}{16} \left( 1 + \frac{\epsilon_{\text{дизл}}}{\epsilon_{\text{ПП}}} \right) \left( 1 + \frac{q}{b} \right)^{-3} \left( 8 + 9 \frac{q}{b} + 3 \left( \frac{q}{b} \right)^2 \right) + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\epsilon_{\text{дизл}}}{\epsilon_{\text{ПП}}} \right) \left( 1 + \frac{q}{b} \right)^{-6}, \quad (23)$$

а вариационный параметр  $b$  находится из условия минимума полной энергии и имеет значение

$$b = \frac{1}{a_*} \left( \frac{33}{2r_s^2} \right)^{1/3}. \quad (24)$$

Определим параметр экранирования  $\lambda$  межчастичного потенциала в данном случае. При этом, рассматривая область  $q \ll 2k_F$ , учтем, что  $\Pi_0(q)$  в этом

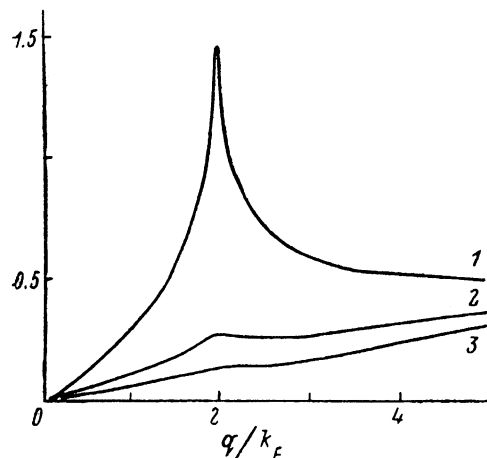


Рис. 1. График функции  $G(q, 0)$  при  $r_s = 0.01$  (1), 2.0 (2), 4.0 (3).

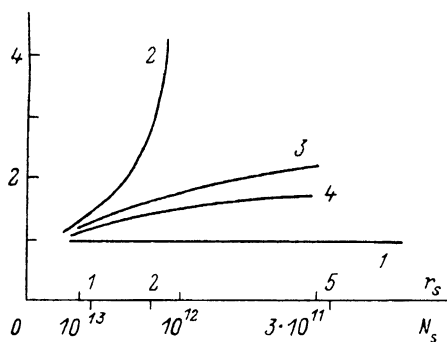


Рис. 2. Зависимость параметра экранирования от электронной плотности.

1 — бесконечно тонкий слой в КРА-приближении, 2 — учет только эффектов обмена, 3 — учет экранирования межчастичного потенциала (обменно-корреляционные эффекты), 4 — самосогласованный учет эффектов обмена и корреляции и конечной толщины слоя.

интервале практически от  $q$  не зависит. Будем также считать, что поправка на локальное поле  $F(q)$  пропорциональна  $q$

$$F(q) \approx f \frac{q}{k_F} \quad (25)$$

в этой же области и учтем зависимость потенциала  $\tilde{W}$  от этого фактора. В результате система самосогласованных уравнений для величин  $\lambda$  и  $f$  принимает вид

$$\lambda = \sqrt{2} r_s \left( 1 + \frac{\sqrt{2} r_s}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \times \frac{\Phi(\sqrt{2-2\cos\varphi})}{\sqrt{2-2\cos\varphi + \lambda(1-f\sqrt{2-2\cos\varphi})\Phi(\sqrt{2-2\cos\varphi})}} \right)^{-1},$$

$$f = \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \frac{\Phi(\sqrt{2-2\cos\varphi})}{\sqrt{2-2\cos\varphi + \lambda(1-f\sqrt{2-2\cos\varphi})\Phi(\sqrt{2-2\cos\varphi})}}. \quad (26)$$

После этого непосредственно получаем и явное выражение для поправки на локальное поле

$$G(q \rightarrow 0) = \frac{q}{k_F} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi (1 - \cos \varphi) \Phi(\sqrt{2 - 2 \cos \varphi})}{\sqrt{2 - 2 \cos \varphi + \lambda} (1 - f \sqrt{2 - 2 \cos \varphi}) \Phi(\sqrt{2 - 2 \cos \varphi})}, \quad (27)$$

а также определяем из (13) и параметр экранирования  $\xi$  внешней примеси

$$\epsilon(q \rightarrow 0) = 1 + \xi q_{TF}/q. \quad (28)$$

Результаты численного расчета зависимости параметра экранирования  $\xi$  от плотности электронов представлены на рис. 2. Как видно, учет конечной толщины проводящего слоя приводит к ослаблению экранировки и, следовательно, к увеличению радиуса экранирования заряженной примеси. Физически это понятно: появление возможности электронам распределяться по толщине слоя приводит к эффективному уменьшению плотности электронов в плоскости слоя и тем самым к ослаблению эффектов экранирования.

Полученное поведение параметра экранирования хорошо согласуется с данными работы [9], где был использован метод функционала плотности и учитывалась конечность толщины слоя.

5) Проведенное рассмотрение показало существенную зависимость радиуса экранирования заряженной примеси от плотности электронов в квазидвумерном взаимодействующем электронном газе. Последовательный самосогласованный учет обменно-корреляционных эффектов и экранирования межэлектронного взаимодействия в чисто двумерном случае приводит к уменьшению радиуса экранирования по сравнению с его значением в РРА-приближении. При этом он остается конечным для всех рассматриваемых электронных плотностей (а соответствующая сжимаемость — положительной). Учет, помимо этого, еще и конечности толщины слоя электронов увеличивает радиус экранирования при уменьшении электронной плотности, но влияние обменно-корреляционных эффектов остается достаточно сильным и сдерживает этот рост. Проявление этих особенностей в поведении радиуса экранирования должно непосредственно сказаться на подвижности электронов в рассматриваемой системе. В частности, по сравнению с РРА-подходом при прочих равных условиях значение подвижности должно возрасти. Отметим в заключение, что ограничение областью однородности для взаимодействующего квазидвумерного электронного газа не учитывает, естественно, такие принципиально возможные и важные эффекты, как образование связанного состояния на примеси или возникновение структурного перехода типа волны зарядовой плотности или скин-поляризованного состояния. Предложенный в настоящей работе многочастичный подход, последовательно учитывающий межэлектронное взаимодействие, в принципе позволяет подойти к рассмотрению и таких эффектов.

#### Список литературы

- [1] Ando T., Fowler A., Stern F. // Rev. Mod. Phys. 1982. V. 54. N 2. P. 5—189.
- [2] Ceperley D. // Phys. Rev. B. 1978. V. 18. N 7. P. 3126—3138.
- [3] Аверкиев Н. С., Пяус Г. Е., Шматов М. Л. // ФТТ. 1988. Т. 30. № 11. С. 3276—3285.
- [4] Максимов Е. Г. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. № 6. С. 2236—2247.
- [5] Ивлиев С. В., Собакин В. Н. Поверхность и эффекты неоднородности твердого тела. М.: Энергоатомиздат, 1987. С. 86—94.
- [6] Streitberger P. // Phys. St. Sol. B. 1984. V. 125. N 2. P. 681—692.
- [7] Горобченко В. Д., Максимов Е. Г. // УФН. 1980. Т. 130. № 1. С. 65—111.
- [8] Santoro G., Giuliani G. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 9. P. 4813—4815.
- [9] Grinberg A., Luryi S. // Phys. Rev. B. 1987. V. 36. N 14. P. 7638—7641.