1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 1
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 1

УДК 537.312 539.171

ДВИЖЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА В КУЛОНОВСКОМ И КОРОТКОДЕЙСТВУЮЩЕМ ПОТЕНЦИАЛАХ ДЛЯ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

С. В. Божокин

Найден энергетический спектр электрона при совместном действии двумерного кулоновского и короткодействующего потенциалов притяжения. Получены выражения для кулоновских бесселевых функций, описывающих рассеяние на кулоновском потенциале. Рассмотрено совместное рассеяние на кулоновском и короткодействующем потенциалах в двумерном случае при низких энергиях электронов.

При определенных условиях электроны и дырки в полупроводниках образуют двумерный электронный газ, который может существовать в инверсионном канале кремниевых МДП — транзисторов, на границе зерен в полупроводниковом бикристалле, а также на поверхности полупроводника, полученного путем скалывания в жидком гелии [1]. На электрические и оптические свойства таких систем большую роль оказывают локализованные состояния, которые создаются двумерными примесными дефектами. Известно, что при введении заряженной примеси в решетку твердого тела обычный кулоновский потенциал такой примеси искажается на малых расстояниях некоторым короткодействующим потенциалом. Соответствующие задачи для нахождения энергетического спектра электрона в поле кулоновского потенциала и сферически симметричной потенциальной ямы были разобраны в работах [2, 3] для трехмерного случая. Однако в двумерном случае ситуация может значительно измениться, так как известно, что любой сколь угодно слабый притягивающий потенциал создает связанное состояние с экспоненциально малой по сравнению с глубиной ямы энергией связи, в то время как для потенциальной ямы в трехмерном случае резкое изменение кулоновской серии (эффект Зельдовича) происходит лишь при значениях мощности ямы, соответствующих условию появления в такой трехмерной яме добавочного уровня энергии.

Целью настоящей работы является нахождение двумерного энергетического спектра при совместном действии кулоновского и короткодействующего потенциалов притяжения. Представляет также интерес рассмотреть задачу рассеяния электронов или дырок на таких двумерных аксиально-симметричных дефектах. Двумерной теории рассеяния посвящены работы [4-8].

В этой статье будет построена теория совместного рассеяния на двумерном кулоновском и короткодействующем потенциалах при низкой энергии налетающей частицы, причем для кулоновского потенциала будет рассмотрен случай притяжения и отталкивания, а короткодействующий потенциал будет предполагаться притягивающим.

1. Дискретный спектр

Рассмотрим состояние дискретного спектра в аксиально-симметричном поле $V(\rho)$, при котором в цилиндрической системе координат $\boldsymbol{\rho}=(\rho, \varphi)$ можно выполнить процедуру разделения переменных для волновой функции

$$\Psi(\rho)=\sum_{m=-\infty}^{\infty} R_m(\rho)\exp im\varphi. \tag{1}$$

Мы будем предполагать квадратичный закон дисперсии электронов или дырок с некоторой эффективной массой μ. Предположим, что заряженные примесные центры, которые могут быть введены в полупроводник контролируемым образом, расположены в плоскости двумерного электронного газа. Влияние окружающих заряженных примесей на электронные свойства двумерного электронного газа обсуждается в [1, 9]. Для построения точно решаемой модели, описывающей дискретный спектр энергии, существующий в поле кулоновского и короткодействующего потенциалов, мы будем описывать короткодействующий потенциал притяжения в виде двумерного дельтаобразного потенциала конечного радиуса

$$V(\rho)=\frac{Ze^2}{\varepsilon\rho}-\frac{\hbar^2 w}{2\mu d}\delta(\rho-d), \tag{2}$$

где $\rho=\sqrt{X^2+Y^2}$ — двумерный радиус-вектор; Z — определяет знак кулоновского потенциала; $Z=-\zeta$, где $\zeta=1$ для потенциала притяжения; d — размер локализации δ-образного потенциала притяжения; $w>0$ безразмерная константа, характеризующая мощность такого потенциала; ε — диэлектрическая проницаемость; μ — эффективная масса. Такая точно решаемая модель δ-образного потенциала притяжения рассматривалась в работе [10], где анализировался трехмерный случай (двумерный радиус-вектор ρ в выражении (2) в этом случае заменяется трехмерным $\mathbf{r}$). Наша задача — применить такой потенциал к двумерному случаю. Наличие в потенциале $V(\rho)$ (2) δ-образного слагаемого позволяет написать граничное условие, определяющее скачок производной волновой функции в точке $\rho=d$.

В двумерном случае уравнение для определения дискретного спектра $E_\perp<0$ ($E_\perp$ — энергия частицы в плоскости xOy) имеет вид

$$wM\left(-\zeta/\lambda+\frac{1}{2}+m,\ 2m+1,\ 2\lambda d/a_0\right)U\left(-\zeta/\lambda+\frac{1}{2}+m,\ 2m+1,\ 2\lambda d/a_0\right)=$$
$$=\frac{\Gamma(2m+1)\exp(2\lambda d/a_0)}{(2\lambda d/a_0)^{2m}\,\Gamma\left(m+\frac{1}{2}-\zeta/\lambda\right)}, \tag{3}$$

где величина λ связана с энергией связи соотношением $\lambda=\sqrt{|E_\perp|/E_0}$; $E_0=e^2/2\varepsilon a_0$ — эффективный ридберг; $a_0=\varepsilon\hbar^2/\mu e^2$ — эффективный боровский радиус; $\zeta=1$ — потенциал притяжения; $M(\alpha,\beta,x)$, $U(\alpha,\beta,x)$ — регулярная и иррегулярная вырожденные гипергеометрические функции; $\Gamma(x)$ — гамма-функция [11]. Спектр задачи при «выключенном» кулоновском потенциале получается из уравнения (3), если параметр $\zeta=0$. Известно [12], что в такой δ-образной аксиально-симметричной яме при фиксированном квантовом числе m всегда существует единственный уровень. Если параметр $2\lambda d/a_0=2\varkappa d\ll 1$ ($\varkappa$ — величина, имеющая размерность волнового вектора, выражающаяся через энергию связанного состояния $E_\perp=-\hbar^2\varkappa^2/2\mu$), то величина $\varkappa$ при $m=0$ имеет вид

$$2\varkappa d\simeq\exp\left[-\left(\frac{1}{w}+2\gamma+\psi\left(\frac{1}{2}\right)\right)\right], \tag{4}$$

где $\gamma=0.5772$ — постоянная Эйлера, $\psi(x)$ — пси-функция [11]. При малой мощности ямы $w\to 0$ мы получаем в двумерном случае экспоненциально малую энергию связи $E_\perp$, и это резко отличается от случая трехмерного δ-образного потенциала $V_s=-\frac{\hbar^2 w}{2\mu d}\delta(r-d)$, где для существования дискретного уровня необходимо, чтобы мощность ямы удовлетворяла неравенству $w>2l+1$, где l — орбитальный момент квантового состояния. Для выполнения неравенства $2\varkappa d\ll 1$ мы должны потребовать, чтобы в аксиально-симметричном случае параметр w был бы мал, $w < w_c$, где $w_c \simeq 0.3$ — критическое значение мощности ямы, при которой $2\varkappa d \simeq 0.08$. В этом случае при заданных $d/a_0 \ll 1$ возникает естественное ограничение на величину рассматриваемых λ ($1/\lambda > 0.25$ при $d/a_0 \simeq 0.01$).

Перейдем к анализу уравнения (3), описывающего состояние в аксиальном потенциале (2) и проанализируем, как включение кулоновского взаимодействия будет изменять дискретный спектр в двумерном случае. Рассмотрим состояния дискретного спектра с $m=0$ и будем считать, что размер ямы $d \ll a_0$, где a_0 — боровский радиус. Отбрасывая в (3) слагае-

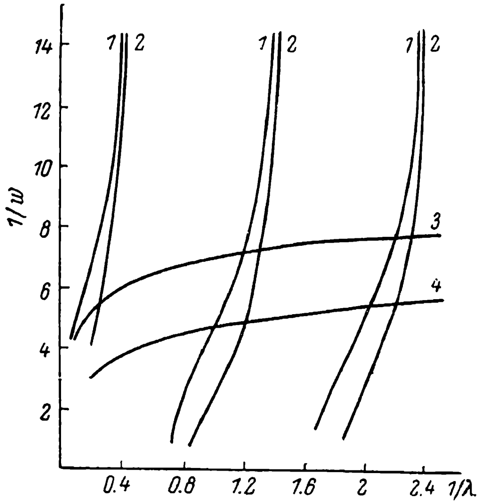

Рис. 1. Двумерный потенциал $V(\rho)$ (2).

Графики функций, представляющие собой левую часть трансцендентного уравнения (5) в зависимости от параметра $1/\lambda$, где $\lambda = \sqrt{|E_\perp|/E_0}$, $E_\perp$ — энергия связи в двумерном случае, $E_0 = e^2/2\varepsilon a_0$ — эффективный ридберг. Соответствующие корни $1/\lambda_\nu$, являющиеся решениями (5), получаются при пересечении прямой $1/w$ графиков этих функций. Кривые *1*, *2* соответствуют включенному кулоновскому притяжению $\zeta=1$ и построены соответственно при $d/a_0=0.001$, $d/a_0=0.01$. Кривые *3*, *4* соответствуют выключенному кулоновскому взаимодействию $\zeta=0$ и построены соответственно при $d/a_0=0.001$ и $d/a_0=0.01$.

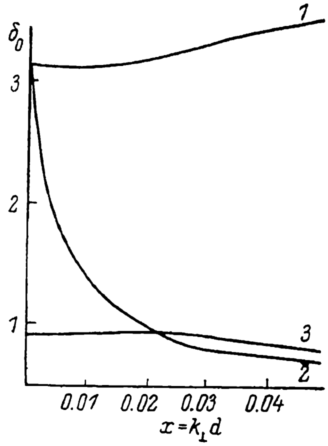

Рис. 2. Зависимость фазы рассеяния δ_0 на двумерном дельтаобразном короткодействующем потенциале $V_s(\rho)$ от безразмерной энергии $k_\perp d = x$.

Кривые соответствуют $w=0.2$, $d/a_0=0.01$. *1* — кулоновское отталкивание $Z=1$, *2* — отсутствие кулоновского взаимодействия $Z=0$, *3* — кулоновское притяжение $Z=-1$.

мые высших порядков по малому параметру $2\lambda d/a_0$, получаем трансцендентное уравнение для определения параметра λ (3)

$$\pi \operatorname{tg} \pi\zeta/\lambda + \ln a_0/2\lambda d - 2\gamma - \psi\left(\frac{1}{2} + \zeta/\lambda\right) = \frac{1}{w}. \tag{5}$$

Уравнение (5), так же как и точное уравнение (3), удовлетворяет предельному случаю движения электрона в чисто кулоновском поле при выключенной δ-образной яме $w \to 0$, когда спектр «двумерного атома водорода» может быть найден точно, $1/\lambda \to N-1/2$ (где N — главное квантовое число $N=1, 2, 3$. $E_\perp = -e^2/2a_0\varepsilon\,(N-1/2)^2$). Решение уравнения (5), определяющие λ при совместном действии двумерного кулоновского притяжения ($\zeta=1$) и дельтаобразной ямы приведены на рис. 1. Предположим, что выполняется неравенство $\delta = \frac{2d}{a_0}\exp\left(\frac{1}{w} + 2\gamma + \psi\left(\frac{1}{2}\right)\right) \ll 1$, которое может быть удовлетворено при $d/a_0 \ll 1$, $w < w_c \simeq 0.3$. Кроме того, мы будем считать, что величины λ (3) находятся в пределах $25d/a_0 < 1/\lambda \ll 1$, что соответствует малым значениям $2\lambda d/a_0$, для которых выведено (5). Тогда в отсутствие кулоновского взаимодействия спектр в яме характеризуется глубоким уровнем, соответствующим величине λ_0, причем $1/\lambda_0 \ll 1$. Включение кулоновского взаимодействия понижает этот уровень энергии и он характеризуется величиной $\lambda_1 > \lambda_0$. Соответствующий сдвиг энергии, получающийся из (5) в наинизшем приближении по параметру $\delta \ll 1$, равен $1/\lambda_0 - 1/\lambda_1 = \pi^2\delta^2/2$.

Пусть короткодействующая яма создает мелкий уровень $1/\lambda_0 \gg 1$. Предположим также, что мощность ямы w, а также параметры a и d подобраны таким образом, что прямая $1/w$ пересекает кривую $\ln a_0/2d\lambda - 2\gamma - \psi(1/2)$ при $1/\lambda_0 = N - 1/2$, где N — целое число, причем $N \gg 1$. Тогда включение кулоновского потенциала приведет к тому, что соответствующий уровень λ_0 понизится и он станет равным $1/\lambda_1 = N - 1/2 - \delta\nu$, где $\delta\nu$ — соответствующий дефект спектра двумерного атома водорода. Отбрасывая слагаемые, имеющие порядок $O(1/N)$, мы можем получить из (5) выражение для $\delta\nu = [\ln N - \psi(1/2)]^{-1}$. Такой сдвиг может быть обнаружен при исследовании оптических спектров двумерных кулоновских потенциалов, искаженных на малых расстояниях притягивающим потенциалом.

2. Двумерная теория рассеяния

Перейдем к исследованию задачи рассеяния электрона с энергией $E_\perp = \hbar^2 k_\perp^2/2\mu$, $k_\perp$ — волновой вектор в плоскости xOy, на потенциале (2). Интегральное уравнение для радиальной функции $R_m(\rho)$ с функцией Грина $G_m(k_\perp;\ \rho,\ \rho')$ имеет вид

$$\left.\begin{aligned} R_m(\rho) &= \exp\frac{im\pi}{2} J_m(k_\perp\rho) + \int_0^\infty d\rho'\rho' G_m(k_\perp;\ \rho,\ \rho')\, V(\rho')\, R_m(\rho'), \\ G_m(k_\perp;\ \rho,\ \rho') &= -i\frac{\mu\pi}{\hbar^2} J_m(k_\perp\rho_<)\, H_m^{(1)}(k_\perp\rho_>), \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

где $J_m(x)$, $H_m^{(1)}(x)$ — функции Бесселя и Ханкеля первого рода, $\rho_< = \min(\rho, \rho')$, $\rho_> = \max(\rho, \rho')$. Эффект рассеяния частицы характеризуется фазой рассеяния δ_m, которая входит при $k_\perp\rho \gg 1$ в выражение для $R_m \sim \dfrac{\cos\left(k_\perp\rho - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} + \delta_m\right)}{\sqrt{k_\perp\rho}}$. Фаза δ_m может быть связана с парциальной амплитудой рассеяния f_m, а полное сечение выражается через δ_m соотношениями, приведенными в [4-7]. Используем рассеяние медленных частиц, для которых выполняется условие $k_\perp d \ll 1$, где d — радиус действия потенциала. Из уравнения (6) следует, что $R_m(\rho) \sim k_\perp^m$, это приводит к тому, что при низких энергиях для двумерного рассеяния фазы $\delta_m(k_\perp)$ убывают по закону $\delta_m(k_\perp) \sim k_\perp^{2m}$ и при $m \neq 0$ основную роль в рассеянии играет фаза δ_0.

Рассмотрим вначале задачу рассеяния на короткодействующем потенциале $V_s(\rho) = -\dfrac{\hbar^2}{2\mu d} w\delta(\rho - d)$. Фаза рассеяния δ_0 и соответствующее сечение σ_s, учитывающее лишь фазу δ_0, имеет вид

$$\operatorname{ctg}\delta_0 = \frac{2}{\pi}\left[\ln\frac{k_\perp}{\varkappa} + \frac{1}{2} r(k_\perp d)^2\right], \quad \sigma_s = \frac{4}{k_\perp\left\{1 + \frac{4}{\pi^2}\left[\ln\frac{k_\perp}{\varkappa} + \frac{1}{2} r(k_\perp d)^2\right]^2\right\}}. \tag{7}$$

Параметр $r = 1/w + 1/2$ для такой δ-образной ямы эквивалентен эффективному радиусу взаимодействия r_0 в трехмерной теории рассеяния, величина $\varkappa$ характеризует энергию связи в такой яме и определяется из (4). Такую же зависимость фазы двумерной теории рассеяния δ_0 от энергии $k_\perp$ (7) при $k_\perp d \ll 1$ можно получить, если использовать задачу рассеяния на аксиально-симметричной прямоугольной яме $V_s(\rho) = -V_0$ при $\rho \leqslant d$, $V_s(\rho) = 0$ при $\rho > d$. В этом случае изменяется лишь величина $\varkappa$, а вид потенциала влияет лишь на параметр r, который для такой ямы равен $r = \hbar^2/2\mu V_0 d^2$.

Разберем задачу рассеяния на двумерном кулоновском потенциале $V_c = Ze^2/\rho$, которая может быть решена точно, если в двумерном лапласиане перейти к координатам $u = \sqrt{X^2 + Y^2} - X$, $v = X$ [8], причем соответствующее сечение рассеяния равно $\sigma_c(\varphi)=\eta\,\mathrm{th}\,\pi\eta/2k_\perp\sin^2\frac{\varphi}{2}$, где $\eta=Ze^2/\hbar v_\perp$ — кулоновский параметр, φ — угол рассеяния.

Целью нашей работы является нахождение решения уравнения Шредингера с двумерным кулоновским потенциалом с помощью разложения по функциям, характеризующимся определенным моментом m, которые понадобятся нам при изучении совместного действия кулоновского и короткодействующего потенциалов. Для регулярного в нуле решения $R_m(x)=i^m\exp(i\Delta_m)J_m^c(x)$ и иррегулярного в нуле решения $R_m(x)\to Q_m(x)=$ $=i^m\exp(i\Delta_m)Y_m^c(x)$ можно получить следующие выражения $J_m^c(x)$, $Y_m^c(x)$, которые мы назовем кулоновскими бесселевыми функциями

$$\left.\begin{aligned}
J_m^c(x)&=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,S_m(\eta)\,x^m\exp(-ix)\,M\left(m+\frac{1}{2}-i\eta,\ 2m+1,\ 2ix\right),\\
Y_m^c(x)&=\sqrt{\frac{2}{\pi}}\,S_m(\eta)\,x^m\exp(-ix)\left[\frac{2^{m+\frac{1}{2}}\exp i\pi\left(m+1-\frac{i\eta}{2}-\frac{\Delta_m}{\pi}\right)}{S_m(\eta)}\times\right.\\
&\left.\times U\left(m+\frac{1}{2}-i\eta,\ 2m+1,\ 2ix\right)-iM\left(m+\frac{1}{2}-i\eta,\ 2m+1,\ 2ix\right)\right],
\end{aligned}\right\}\tag{8}$$

где $x=k_\perp\rho$ — безразмерная координата; $\eta=Ze^2/\varepsilon\hbar v_\perp$ — кулоновский параметр; $v_\perp=\hbar k_\perp/\mu$ — скорость частицы; $S_m(\eta)$ — фактор, описывающий проникновение частицы в кулоновский барьер; Δ_m — кулоновская фаза

$$S_m(\eta)=\frac{2^{m-\frac{1}{2}}\left|\Gamma\left(m+\frac{1}{2}+i\eta\right)\right|\exp\left(-\frac{\pi}{2}\eta\right)}{\Gamma(2m+1)},\qquad \Delta_m=\arg\Gamma\left(m+\frac{1}{2}-i\eta\right).\tag{9}$$

Якобиан кулоновских бесселевых функций равен $\{J_m^c(x),\,Y_m^c(x)\}=2/\pi x$. На больших расстояниях от рассеивающего центра $x=k_\perp\rho\gg1$ асимптотика кулоновских бесселевых функций имеет вид

$$J_m^c(x)+iY_m^c(x)\simeq\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\exp i\left(x+\Delta_m-\frac{\pi}{2}m-\frac{\pi}{4}-\eta\ln 2x\right).$$

При рассеянии частицы на потенциале (2) к кулоновской фазе Δ_m добавляется короткодействующая фаза δ_m, так что $\Delta_m\to\Delta_m+\delta_m$, причем полное сечение рассеяния σ складывается из кулоновского рассеяния σ_c, рассеяния на короткодействующем потенциале σ_s, а также из интерференционного слагаемого, описывающего такое совместное рассеяние. Используя разложение вырожденных гипергеометрических функций в ряд по бесселевым функциям [11] и учитывая, что при низких энергиях $k_\perp d\ll1$ фазы δ_m с $m\neq0$ малы, для фазы δ_0 получаем выражение, в котором отброшены слагаемые второго порядка по величине $x\,|\eta|=d/a_0\ll1$,

$$S_0^2\,\mathrm{ctg}\,\delta_0+\psi\left(\frac{1}{2}\right)-\mathrm{Re}\,\psi\left(\frac{1}{2}-i\eta\right)=\ln\frac{x}{\varkappa d}-4x\eta\left(\frac{1}{w}+1\right)+\frac{x^2}{2}\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{w}\right),\tag{10}$$

где $x=k_\perp d$ — безразмерная координата, взятая при $\rho=d$; $S_0^2=\pi/(\exp 2\pi\eta+1)$ (9); $\eta=Ze^2/\varepsilon\hbar v_\perp$ — кулоновский параметр; величина $\varkappa$ определяет энергию связи в дельтаобразной яме (4). Искажение короткодействующей фазы δ_0 кулоновским взаимодействием представлено на рис. 2. Отметим, что в двумерном потенциале притяжения при любой малой интенсивности взаимодействия имеется связанное состояние независимо от величины w, поэтому $\delta_0\,(k_\perp\to0)=\pi$. В этом случае падающая частица с энергией $E_\perp$ может быть временно захвачена в такое метастабильное состояние, что и приводит к резкому увеличению сечения рассеяния. Кулоновский барьер отталкивания $Z=1$ (2) препятствует резкому изменению величины δ_0, соответствующей рассеянию на короткодействующем потенциале. Кроме того, сечение рассеяния на короткодействующем потенциале σ_s при $k_\perp d \ll 1$ становится аномально велико из-за бесконечной протяженности потенциала рассеяния по оси z (7).

Существенно, что в двумерном электронном газе незначительный потенциал малой мощности w, присутствующий на малых расстояниях в любой кулоновской примеси, может сильно повлиять на величину суммарного рассеяния. Так, например, невозможность согласовать экспериментальные результаты по подвижности носителей в двумерных системах с теорией кулоновского рассеяния заставила экспериментаторов постулировать наличие дополнительного механизма рассеяния [1, 13, 14], который связывается с рассеянием на нейтральных примесях. Однако любой малый притягивающий потенциал в центре самой кулоновской примеси может в двумерном случае значительно изменить сечение и это не требует для объяснения результатов введения дополнительного механизма.

В заключение автор благодарит В. А. Харченко за обсуждение работы.

Литература

[1] *Андо Т., Фаулер А., Стерн Ф.* Электронные свойства двумерных систем. М.: Мир, 1985. 415 с.
[2] *Зельдович Я. Б.* ФТТ, 1959, т. 1, № 11, с. 1637—1641.
[3] *Гринберг А. А.* ФТП, 1977, т. 11, № 10, с. 1909—1913.
[4] *Бабиков В. В.* Метод фазовых функций в квантовой мехнике. М.: Наука, 1976. 288 с.
[5] *Lapidus I. R.* Amer. J. Phys., 1982, vol. 50, N 1, p. 45—47.
[6] *Лухвич А. А., Каролик А. С.* ФТТ, 1982, т. 54, № 5, с. 909—914.
[7] *Лухвич А. А., Каролик А. С.* ФММ, 1984, т. 58, № 6, с. 1076—1079.
[8] *Stern F., Howard W. E.* Phys. Rev., 1967, vol. 163, N 3, p. 816—835.
[9] *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 44, № 11, с. 520—522.
[10] *Мур В. Д., Попов В. С.* ТМФ, 1986, т. 65, № 2, с. 238—249.
[11] *Абрамовиц М. Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 832 с.
[12] *Галицкий В. М., Карнаков Б. М., Коган В. И.* Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1981. 648 с.
[13] *Matsumoto Y., Uemura Y* Proc of the Second International Conference on Solid Surfaces, Kyoto, Jpn, J. Appl. Phys. Suppl., 1974, vol. 2, Pt. 2, p. 367—370.
[14] *Takada Y* J. Phys. Soc. Japan, 1979, vol. 46, p. 114—122.

Ленинградский политехнический институт
им. М. И. Калинина
Ленинград

Поступило в Редакцию
4 мая 1987 г.
В окончательной редакции
20 июля 1987 г.