

# 半导体反型层中的电子关联 和多体波函数

汪鸿伟<sup>1)</sup> 邵金山

江西师范大学物理系

冯伟国<sup>2)</sup> 孙 鑫

复旦大学物理系

1988年9月12日收到

本文运用 CBF (correlation basis function) 理论, 由电子间的有效势  $V_{\text{eff}}(R)$  和电子气的集体振荡行为, 给出准二维电子体系——半导体反型层中的电子的关联因子  $U(R)$ , 得到该体系的对关联函数、关联能和多体波函数.

## 一、引言

近十多年来, 对二维及准二维电子气的研究已有许多较成功的理论<sup>[1-8]</sup>, 例如 RPA, HA, STLS 局域场自治近似<sup>[7]</sup>以及耦合集团展开<sup>[8]</sup>等等。这些工作一般都给出交换关联能的数值结果, 但是其中一些没有给出体系的对关联函数, 有的虽给出对关联函数, 但是其关联函数不能保证其恒正、归一的特征, 也不能描写在粒子间距较大时关联函数的量子振荡行为, 所以由此获得的物理结果难以保证其确定性和可靠性。

另一方面, 象半导体反型层、异质结和量子阱这些真正的电子体系, 实际上都是准二维电子体系, 即电子虽然动力地被限制在一个平面上, 但是沿第三维方向上仍具有一定分布, 这个效应也应在实际的计算中予以考虑。本文将应用 CBF 理论着重讨论 Si(100)-SiO<sub>2</sub> 反型层中的电子关联, 求出该电子体系的对关联函数、关联能和多体波函数。

## 二、有效势和关联因子

由文献 [2, 7, 8], 对反型层中电子沿第三维的分布, 可由 Fang-Howard 变分波函数描写

$$\phi_0(z) = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{\frac{1}{2}} z e^{-\frac{b z}{2}}, \quad (1)$$

则电子间相互作用有效势为

1) 现在地址: 江西省九江师范专科学校物理系。

2) 现在地址: 同济大学物理系。

$$V_{\text{eff}}(R) = \frac{e^2}{\kappa_{sc}} \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \frac{|\phi_0(z)|^2 |\phi_0(z')|^2}{[R^2 + (z - z')^2]^{\frac{1}{2}}} \\ + e^2 \frac{\kappa_{sc} - \kappa_{ins}}{\kappa_{sc} + \kappa_{ins}} \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \frac{|\phi_0(z)|^2 |\phi_0(z')|^2}{[R^2 + (z + z')^2]^{\frac{1}{2}}}. \quad (2)$$

对(2)式作 Fourier 变换,即有

$$V(q) = \frac{2\pi e^2}{\bar{\kappa}q} F(q), \quad (3)$$

式中  $F(q)$  为形式因子,对 Si(100)-SiO<sub>2</sub> 反型层,形式因子为

$$F(q) = \left(1 + \frac{\kappa_{ins}}{\kappa_{sc}}\right) \left[ \frac{3}{16} \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-1} + \frac{3}{16} \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-2} + \frac{1}{8} \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-3} \right] \\ + \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\kappa_{ins}}{\kappa_{sc}}\right) \left(1 + \frac{q}{b}\right)^{-6}, \quad (4)$$

式中  $\kappa_{ins}$  为绝缘体介电常数,  $\kappa_{sc}$  为半导体介电常数,  $b$  为变分参数,由前人验证,将它对单粒子能量变分取值,精度已足够好,取为

$$b = \left[ \frac{48\pi e^2 m_z}{\kappa_{sc} \hbar^2} \left( N_{\text{dep}} + \frac{11}{32} N_{\text{inv}} \right) \right]^{\frac{1}{3}}, \quad (5)$$

式中  $N_{\text{dep}}$ ,  $N_{\text{inv}}$  分别为耗尽层、反型层中电子密度。由(3)式,显然当  $F(q) = 1$  时,即回到理想二维的情况。

根据 CBF 理论,多电子体系的基态波函数可一般地写成<sup>[9]</sup>

$$\psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) = D[\varphi] \exp[u(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)], \quad (6)$$

式中  $D[\varphi]$  为单电子轨道  $\varphi_\mu$  构成的 Slater 行列式,关联因子  $u(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ <sup>[9,10]</sup> 对于电子的交换是对称的,反映了电子关联并可根据变分原理确定。由于电子间是排斥相互作用,当电子密度不是很高时,三体以及三体以上的关联可以忽略,于是以上 Jastrow-Feenberg 变分波函数可写成

$$\psi(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) = D[\varphi] \exp \left[ \frac{1}{2} \sum_{i < j} u(|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|) \right]. \quad (7)$$

另一方面,按照 Bohm-Pines 理论<sup>[11]</sup>,在多电子体系中存在着一个最大波矢  $q_c$ ,当  $q > q_c$  时为单粒子自由度;而当  $q < q_c$  时为集体自由度。由正则变换可得基态波函数为

$$\psi = D[\varphi] \exp \left\{ -\frac{1}{A} \sum_{q < q_c} \frac{V(q) \rho_q^+ \rho_q^-}{2\hbar\omega_p(q)} \right\}, \quad (8)$$

式中  $\rho_q$  为密度涨落,

$$\rho_q = \sum_i e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i}, \quad (9)$$

比较(7),(8)两式,立即可以看出关联因子为

$$u(R) = -\frac{1}{A} \sum_{q < q_c} V(q) \frac{2e^{i\mathbf{R} \cdot \mathbf{q}}}{\hbar\omega_p(q)} \\ = -\frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{q} \frac{2V(q) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}}}{\hbar\omega_p(q)} \delta(q_c - q). \quad (10)$$

从(10)式不难看出  $u(R)$  的 Fourier 变换式  $c(q)$  为

$$c(q) = -\frac{2V(q)}{\hbar\omega_p(q)} \vartheta(q_c - q), \quad (11)$$

式中

$$\vartheta(x) = \begin{cases} 1 & x \geq 0; \\ 0 & x < 0. \end{cases} \quad (12)$$

$\omega_p(q)$  为等离子振荡频率, 由电子气集体振荡理论<sup>[12]</sup>, 将密度涨落对时间连续求两次微商, 可得等离子频率为

$$\omega_p(q) = \sqrt{nq^2V(q)/m^*}, \quad (13)$$

$m^*$  为反型层中电子的有效质量。将(13)式代入(11)式即有

$$c(q) = -\frac{2}{\hbar q} \sqrt{m^*V(q)/n} \vartheta(q_c - q). \quad (14)$$

### 三、关联函数方程

在关联因子中引入一个强度因子  $\lambda$ ,

$$P(\lambda) = \exp \left\{ \frac{\lambda}{2} \sum_{i < j} u(R_{ij}) \right\}, \quad (15)$$

由此则与强度因子  $\lambda$  有关的波函数为

$$\phi(\lambda) = \phi(R_1, R_2, \dots, R_N | \lambda) = P(\lambda) D[\varphi]. \quad (16)$$

按照对关联函数的定义, 可有

$$g(R_{12} | \lambda) \equiv \frac{1}{n^2} \frac{N!}{(N-2)!} \int |\phi(\lambda)|^2 dR_3 \cdots dR_N / \int |\phi(\lambda)|^2 dR_1 \cdots dR_N. \quad (17)$$

静态结构因子为  $S(q)$ , 它与  $g(R)$  的关系是互为 Fourier 变换

$$g(R | \lambda) = 1 + \frac{1}{n(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} [S(q | \lambda) - 1], \quad (18)$$

$$S(q | \lambda) = 1 + n \int d^2R e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} [g(R | \lambda) - 1]. \quad (19)$$

以上两式, 当  $\lambda = 0$  时为 Hartree-Fock 情况; 而当  $\lambda = 1$  即为要求的有相互作用的情况。将(17)式对  $\lambda$  求导数, 并利用卷积近似<sup>[13]</sup>, 类似于文献[15—20], 可得

$$\frac{d\phi(R_{12} | \lambda)}{d\lambda} = \sum_{i=1}^3 I_i(\lambda), \quad (20)$$

式中

$$I_1(\lambda) = g(R_{12} | \lambda) [ \text{图示} + 2 \cdot (\text{图示}) + \text{图示}], \quad (21)$$

$$I_2(\lambda) = 2 \cdot (\text{图示}) + 2 \cdot (\text{图示}) + \text{图示}, \quad (22)$$

$$I_3(\lambda) = 2 \cdot (\text{图示}) + 2 \cdot (\text{图示}) + 2 \cdot (\text{图示}) + \text{图示}. \quad (23)$$

上式中, 直线表示  $h(R_{ij}|\lambda)$ , 波纹线表示  $u(R_{ij}|\lambda)$ , 实心圆表示带权积分  $n \int \cdots dR_i$ ,

空心圆表示不积分的外点。  $h(R_{12}|\lambda)$  由对关联函数定义

$$h(R_{12}|\lambda) \equiv g(R_{12}|\lambda) - 1, \quad (24)$$

并满足归一条件

$$-n \int d^2R h(R|\lambda) = 1. \quad (25)$$

对(20)式的  $I_1, I_2, I_3$  进行 Fourier 变换, 并对  $\lambda$  积分可得

$$g(R|\lambda) = g_{HF}(R) \exp \left\{ \int_0^\lambda d\lambda' \left[ \sum_{i=1}^3 B_i(\lambda') \right] \right\}, \quad (26)$$

式中,

$$B_1(\lambda') = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} c(q) S^2(q|\lambda'), \quad (27)$$

$$B_2(\lambda') = \frac{2}{g(R|\lambda')(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} [S(q|\lambda') - 1] A(q|\lambda'), \quad (28)$$

$$B_3(\lambda') = \frac{1}{g(R|\lambda')(2\pi)^2} \int d^2q e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} [S(q|\lambda') - 1]^2 A(q|\lambda'), \quad (29)$$

而

$$A(q|\lambda') = \int d^2R e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}} h(R|\lambda') B_1(\lambda'). \quad (30)$$

同时易得  $S(q)$  的方程

$$\begin{aligned} S(q|\lambda) &= S_{HF}(q) \left\{ 1 - S_{HF}(q) [\lambda n c(q) + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\lambda d\lambda' \int d^2q' c(q') S^2(q'|\lambda')] \right. \\ &\quad \left. \cdot (S(|\mathbf{q} + \mathbf{q}'| |\lambda') - 1) \right\}^{-1}. \end{aligned} \quad (31)$$

为了验证以上求解的可靠性, 考察  $S(q)$  的渐近行为, 当  $q \rightarrow 0$  时, 从(31)式有

$$S(q) = -\frac{1}{nc(q)} = \frac{1}{n} \frac{\hbar q}{2} \sqrt{\frac{n}{V(q)m^*}}. \quad (32)$$

而由介电函数理论,  $S(q)$  与介电函数之间有关系<sup>[12]</sup>

$$S(q) = -\frac{\hbar}{nV(q)} \int_0^\infty \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right] \frac{d\omega}{\pi}. \quad (33)$$

根据在  $q \rightarrow 0$  时的  $f$  求和规则<sup>[2]</sup>

$$\int_0^\infty d\omega \omega \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right] = -\frac{\pi}{2} \omega_p^2(q), \quad (34)$$

和 Kramers-Kronig 关系

$$\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega} \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right] = \frac{\pi}{2} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, 0)} - 1 \right], \quad (35)$$

可得

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \text{Im} \left[ \frac{1}{\epsilon(q, \omega)} \right] = -\frac{\pi}{2} \omega_p(q) \delta(\omega - \omega_p(q))^{[19, 20]}. \quad (36)$$

所以在长波限下， $S(q)$  须满足的必要条件为

$$\lim_{q \rightarrow 0} S(q) = \frac{\hbar\omega_p(q)}{2nV(q)} = \frac{\hbar q}{2n} \sqrt{\frac{n}{V(q)m^*}}. \quad (37)$$

比较(32), (37)式, 显然本文中的关联因子满足这一必要条件.

#### 四、交换、关联能的表达式

对一个多电子体系, 其哈密顿量一般可写成

$$H = H_0 + H_{int}, \quad (38)$$

$H_0$  为体系无相互作用时的能量标符,  $H_{int}$  为粒子间的相互作用. 在准二维体系中, 粒子间以有效势相互作用, 即

$$H_{int} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^N V_{eff}(R_{ij}). \quad (39)$$

定义

$$H(\lambda) = H_0 + H_{int}(\lambda) = H_0 + \lambda^2 H_{int}, \quad (40)$$

$\lambda$  为强度因子, 不难看出  $\lambda$  恰恰也就是本文中(16)式的多体波函数的强度因子, 当  $\lambda = 0$ ,  $H = H(0) = H_0$ , 为无相互作用的哈密顿量; 当  $\lambda = 1$ ,  $H(1)$  即为相互作用体系的哈密顿量. 所以

$$H(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle = E(\lambda)|\psi(\lambda)\rangle, \quad (41)$$

$$H(0)|\psi(0)\rangle = H_0|\psi(0)\rangle = E_0|\psi(0)\rangle. \quad (42)$$

而与强度因子有关的多粒子体系的能量为

$$E(\lambda) = \langle \psi(\lambda) | H(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle / \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle. \quad (43)$$

不难证明

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} = \langle \psi(\lambda) \left| \frac{\partial}{\partial \lambda} H_{int}(\lambda) \right| \psi(\lambda) \rangle / \langle \psi(\lambda) | \psi(\lambda) \rangle. \quad (44)$$

则体系的总能量为

$$E = E_0 + \int_0^1 d\lambda \cdot 2\lambda \tilde{V}_{xc}(\lambda), \quad (45)$$

其中

$$\tilde{V}_{xc}(\lambda) = \frac{1}{2} \int d^2 \mathbf{R}_1 \int d^2 \mathbf{R}_2 V_{eff}(R_{12}) n^2 [g(R_{12} | \lambda) - 1]. \quad (46)$$

而平均每个粒子能量为

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \varepsilon_0 + n \int_0^1 \lambda d\lambda \int d^2 \mathbf{R} V_{eff}(R) [g(R | \lambda) - 1] \\ &= \varepsilon_0 + \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^1 \lambda d\lambda \int d^2 \mathbf{q} V(q) [S(q | \lambda) - 1]. \end{aligned} \quad (47)$$

上式等号右端第二项为交换关联能, 该项若  $\lambda = 0$ , 立即给出交换能为

$$\varepsilon_x = \frac{1}{2} n \int d^2 \mathbf{R} V_{eff}(R) [g_{HF}(R) - 1]$$

$$= \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{q} V(\mathbf{q}) [S_{HF}(q) - 1]. \quad (48)$$

由此关联能为

$$\begin{aligned} \varepsilon_c &= n \int_0^1 \lambda d\lambda \int d^2\mathbf{R} V_{eff}(R) [g(R|\lambda) - g(R|0)] \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^1 \lambda d\lambda \int d^2\mathbf{q} V(\mathbf{q}) [S(q|\lambda) - S(q|0)]. \end{aligned} \quad (49)$$

## 五、数 值 结 果

为了与其他理论进行比较,本文的参数选用与文献[7, 8]相同,即  $\kappa_{in} = 3.8$ ,  $\kappa_{sc} = 11.8$ ,  $N_{depl} = 7.6 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ,  $m^* = 0.19m_0$ ,  $m_s = 0.916m_0$ ,  $\kappa = (\kappa_{in} + \kappa_{sc})/2 = 7.8$ , 其中  $m_0$  为电子真空质量。以费密波矢的倒数  $k_F^{-1}$  为长度单位将各积分式无量纲化,为简单计不考虑简并 ( $n_s = 1$ ), 费密波矢为

$$k_F = \sqrt{2/r_s a_B^*}, \quad (50)$$

式中  $a_B^*$  为有效 Bohr 半径,

$$a_B^* = \kappa \hbar^2 / m^* e^2. \quad (51)$$

能量单位本文采用有效里德堡 Ryd\*

$$\text{Ryd}^* = m^* e^4 / 2 \kappa^2 \hbar^2. \quad (52)$$

二维的 Hartree-Fock 的结构因子由电子气理论<sup>[12]</sup>表示为

$$S_{HF}(q) = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \left\{ \sin^{-1} \left( \frac{q}{2k_F} \right) + \frac{q}{2k_F} \left[ 1 - \left( \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right\} & (q/k_F \leq 2), \\ 1 & (q/k_F > 2). \end{cases} \quad (53)$$

以  $S_{HF}(q)$  为初值叠代求解关联函数的积分方程(26)。计算过程是这样的,对于一个密度值对应  $r_s$ ,选取一个变分参数  $q_c$  代入  $c(q)$ ,然后对每一个  $\lambda$  值反复叠代求解关联函数方程,得到相应的关联函数并利用(48),(49)式求得交换能、关联能,如此最后得到基态能与变分参数  $q_c$  的关系。

在选定  $q_c$  时,要求该  $q_c$  所对应的基态能最小,而且每个  $\lambda$  值的关联函数的归一化情况都比较好,此时  $q_c$  所对应的关联函数和关联能即为所求的。

在图 1 中给出  $r_s = 0.5, 1, 2, 4, 8, 16$  六种密度的关联函数的数值结果。在  $R$  较大处的量子振荡行为也表示在图 1 中的小方框内。图 1 中还给出部分其他理论的结果[7]。可以看出在高密度时,这些理论结果都接近于 Hartree-Fock 结果,在密度减小至  $r_s = 4$  时, RPA 和 HA 在  $R$  较小处已经为负,理论和数值结果可以证明,本文的关联函数恒正,这也是 CBF 理论优点之一。

从图 1 中还可以看出,随着密度的减小,关联函数的形状变得陡峭,量子振荡也加剧,这与预期的物理图象一致。

在表 1 中给出关联能、交换能以及变分参数  $q_c$  的数值,不难发现  $r_s$  从 0.5 变化到 16,  $q_c$  的值在 0.6 至 1.6 之间变化,这与文献[7]中用 STLS 方法计算的等离子体色散曲线反

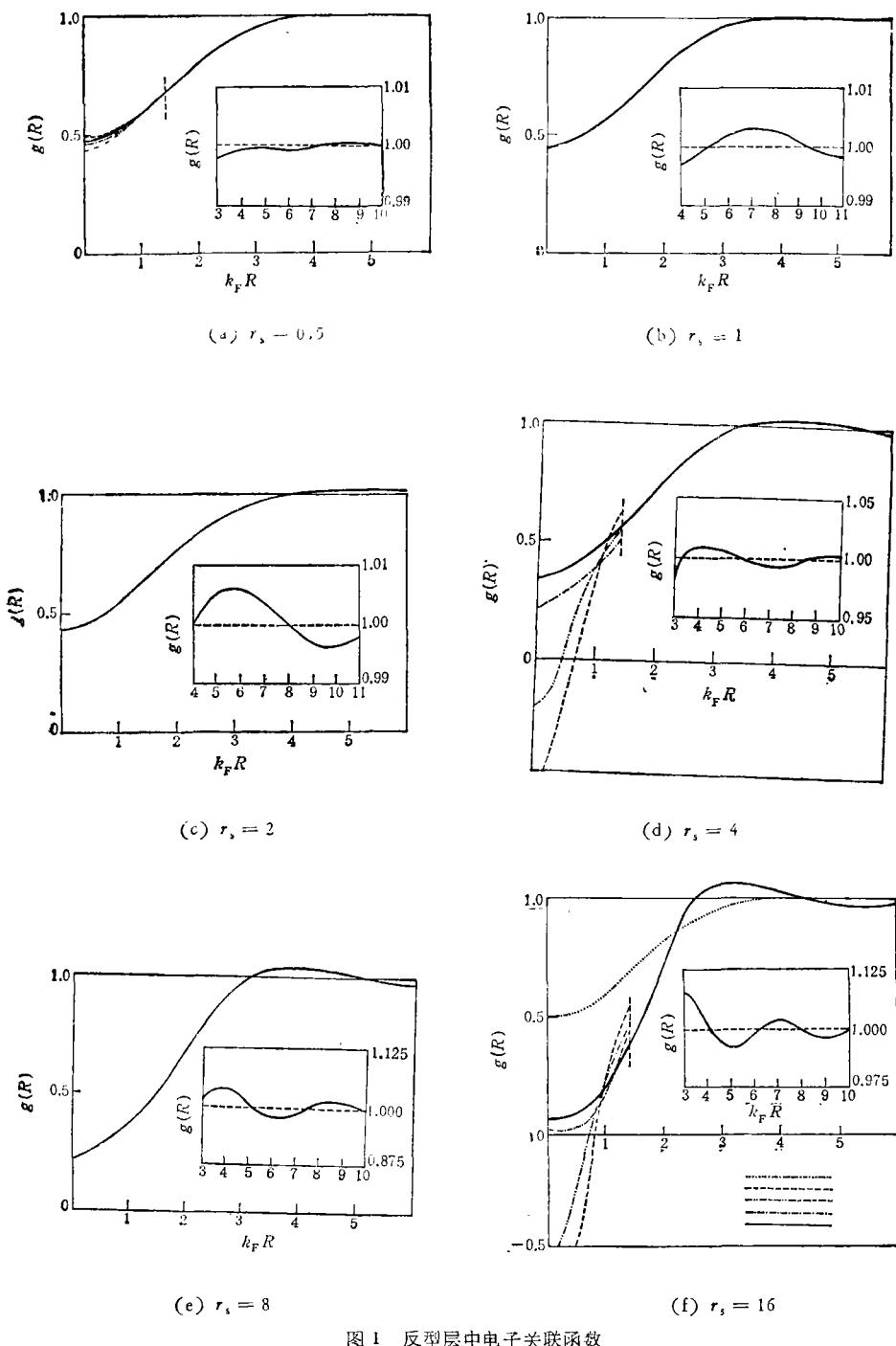


图1 反型层中电子关联函数  
 ..... 为 HF; ---- 为 RPA; - - - 为 HA; - · - 为 STLS; —— 为 CBF

缺的  $q_c$  的范围基本符合,说明运用 Boltz-Pines 理论求取关联因子的可靠性。

本文求得了半导体反型层中电子的对关联函数和多体波函数以及交换能、关联能。事

表 1 交换能、关联能、变分参量数值表

$r_s$	$q_c$	$-\varepsilon_x$ 本文	$-\varepsilon_x^{\text{Joso}}$	$-\varepsilon_c$ 本文	$-\varepsilon_c^{\text{RPA}}$	$-\varepsilon_c^{\text{HA}}$	$-\varepsilon_c^{\text{TLS}}$	$-\varepsilon_c^{\text{cc-ring}}$
0.5	0.6	1.379	1.382	0.068	0.077	0.061	0.060	0.0610
1	0.8	0.749	0.751	0.064	0.079	0.061	0.060	0.0591
2	0.9	0.405	0.407	0.051	0.078	0.060	0.058	0.0546
4	1.1	0.222	0.222	0.048	0.076	0.058	0.049	0.0492
8	1.3	0.122	0.122	0.040	0.074	0.057	0.044	0.0446
16	1.6	0.067	0.067	0.033	0.070	0.055	0.034	0.0393

$\varepsilon_x^{\text{Joso}}$ ,  $\varepsilon_c^{\text{RPA}}$ ,  $\varepsilon_c^{\text{HA}}$ ,  $\varepsilon_c^{\text{TLS}}$  取自文献 [7],  $\varepsilon_c^{\text{cc-ring}}$  取自文献 [8].

实上,这是从另外的量子多体理论角度研究准二维电子气性质的一个尝试,不难将此方法推广计算其他准二维电子体系如异质结、量子阱等等<sup>[14]</sup>,有关工作也即将完成。

- [1] 孙鑫,物理学进展,5(1985),467;6(1986),1;6(1986),123.
- [2] T. Ando, *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, 54(1982), 437.
- [3] R. K. P. Zia, *J. Phys. C*, 6(1973), 3121.
- [4] D. Ceperley, *Phys. Rev.*, B18(1978), 3126.
- [5] A. Czachor *et al.*, *Phys. Rev.*, B25(1982), 2144.
- [6] P. M. Lam, *Z. Phys.*, B50(1983), 337.
- [7] M. Jonson, *J. Phys. C*, 9(1976), 3055.
- [8] D. L. Freeman, *Solid State Commun.*, 26(1978), 289.
- [9] F. Feenberg, *Theory of Quantum Fluids*, Academic, New York, (1969); C. W. Woo, *Physics of Liquid and Solid Helium*, ch5, John Wiley-Interscience, (1976).
- [10] S. Charkravarty and C. W. Woo, *Phys. Rev.*, B13(1976), 4815.
- [11] D. Bohm, K. Huang and D. Pines, *Phys. Rev.*, 107(1957), 71.
- [12] D. Pines, *Elementary Excitation In Solids*, W. A. Benjamin Inc., New York, (1963).
- [13] F. Y. Wu and M. K. Chien, *J. Math. Phys.*, 11(1970), 1912.
- [14] Umbelino de Freitas *et al.*, *Phys. Rev.*, B36(1987), 6677.
- [15] 孙 鑫,李铁城,吴家玮,物理学报,31(1982), 1466; 1474.
- [16] 冯伟国,孙 鑫,物理学报,33(1984), 1719.
- [17] 冯伟国,孙 鑫,物理学报,34(1985), 866.
- [18] 冯伟国,孙 鑫,物理学报,35(1986), 598.
- [19] 冯伟国,孙 鑫,物理学报,36(1987), 1133.
- [20] 虞恩溪,孙 鑫,钱永嘉,低温物理学报,8(1986), 89.

## ELECTRON CORRELATION AND MANY-BODY WAVE FUNCTION OF THE SEMICONDUCTOR INVERSION LAYER

WANG HONG-WEI SHAO JIN-SHAN

*Department of Physics, Jiangxi Normal University, Nanchang*

FENG WEI-GUO SUN XIN

*Department of Physics, Fudan University, Shanghai*

(Received 12 September 1988)

### ABSTRACT

The correlation factor  $u(R)$  in the quasi two dimensional system—the inversion layer is obtained with the effective interaction potential  $V_{eff}(R)$  and the collective oscillation behavior of the electron gas. The pair correlation function the correlation energy and the many-body wave function have been calculated on the basis of the CBF theory.