

# Пьезоэлектрический механизм ориентации двухслойного вигнеровского кристалла в матрице GaAs

Д. В. Филь

*Институт монокристаллов НАН Украины, пр. Ленина, 60, г. Харьков, 61001, Украина*  
E-mail: fil@isc.kharkov.com

Статья поступила в редакцию 21 декабря 2000 г.

Рассмотрен механизм ориентации двухслойных классических вигнеровских кристаллов в пьезоэлектрической среде. Для системы GaAs рассчитана поправка к электростатическому взаимодействию между электронами, определяемая пьезоэлектрическим эффектом. Показано, что учет такой поправки приводит к зависимости полной энергии электронного кристалла от его ориентации относительно кристаллографических осей матрицы окружения. Получено обобщение метода Эвальда для расчета анизотропного взаимодействия между электронами в вигнеровском кристалле. С использованием этого метода рассчитана энергия двухслойных вигнеровских кристаллов в электронных слоях, параллельных кристаллографическим плоскостям (001), (0-11), (111), в зависимости от их ориентации и расстояния между слоями и найдена наиболее энергетически выгодная ориентация для всех типов электронных решеток в двухслойной системе. Показано, что в двухслойном вигнеровском кристалле фазовые переходы между структурами с различной симметрией решетки могут сопровождаться изменением его ориентации.

Розглянуто механізм орієнтації двошарових класичних вігнерівських кристалів в п'єзоелектричному середовищі. Для системи GaAs розраховано поправку до електростатичної взаємодії між електронами, що визначається п'єзоелектричним ефектом. Показано, що врахування такої поправки призводить до залежності повної енергії електронного кристалу від його орієнтації відносно кристаллографічних вісей матриці оточення. Отримано узагальнення метода Евальда для розрахунку анізотропної взаємодії між електронами в вігнерівському кристалі. З використанням цього метода розраховано енергію двошарових вігнерівських кристалів в електронних шарах, паралельних кристаллографічним площинам (001), (0-11), (111), в залежності від їх орієнтації та відстані між шарами та знайдено найбільш енергетично вигідну орієнтацію для всіх типів електронних ґраток в двошаровій системі. Показано, що в двошаровому вігнерівському кристалі фазові переходи між структурами з відмінною симетрією ґратки можуть супроводжуватися зміною його орієнтації.

PACS: 73.20.Dx, 77.65.-j

## 1. Введение

Известно, что система электронов в присутствии компенсирующего положительного фона при достаточно низких температурах и плотностях переходит в состояние вигнеровского кристалла. Такая ситуация, в частности, имеет место в двумерных электронных слоях в гетеропереходах AlGaAs–GaAs. Образование фазы вигнеровского кристалла происходит при условии, что среднее расстояние между электронами значительно превосходит эффективный боровский радиус (в отсутствие внешнего магнитного поля) либо циклотронный радиус (в сильных магнитных полях). Последняя ситуация отвечает фактору заполне-

ния  $\nu \ll 1$ . В квантовых холловских системах образование модулированных электронных структур возможно и при других режимах. Так, в режиме квантового ферромагнетика ( $\nu \approx 1, 1/3$ ) могут возникать скирмионные решетки [1]. В слабых магнитных полях ( $\nu \approx N + 1/2$ , где  $N$  — целое и  $N \geq 4$ ) на верхнем частично заполненном уровне Ландау возможно образование страйп-структур. Образование таких структур было предсказано теоретически [2] и подтверждено экспериментально [3] при наблюдении эффекта сильной анизотропии проводимости.

Интересным является вопрос об ориентации неоднородных электронных структур относительно кристаллографических осей матрицы окруже-

ния. В двумерных электронных слоях, реализованных в гетероструктурах AlGaAs, существенное влияние на ориентацию электронной решетки может оказывать пьезоэлектрическое взаимодействие между электронной и упругой подсистемами. Впервые на такую возможность применительно к вигнеровским кристаллам было указано в работах [4,5]. В работе [6] рассматривался пьезоэлектрический механизм ориентации страйп-структур. В частности, в этой работе был обнаружен эффект переориентации страйпов в двухслойных системах, который возникает в случае, когда период структуры превышает расстояние между слоями. В [6] для описания электронной подсистемы использовалась модель волны зарядовой плотности. Целью настоящей работы является рассмотрение пьезоэлектрического механизма ориентации неоднородных электронных структур в двухслойных системах в другом предельном случае, который соответствует не волне зарядовой плотности, а классическому вигнеровскому кристаллу. Как и в работе [6], используется модель, в которой учитывается анизотропия упругих модулей в кристаллической матрице гетероструктуры. Для точного расчета энергии системы с анизотропным взаимодействием между электронами развивается подход, который является обобщением метода Эвальда для расчета кулоновских сумм. Как частный случай, в работе получены результаты, относящиеся к монослойной системе. Этот вопрос ранее рассматривался в работе [5], автор которой ограничился лишь модельной ситуацией изотропного кристалла. Такая модель не дает ответа на вопрос, какая именно ориентация будет иметь место в системе GaAs, упругие свойства которой описываются не двумя, а тремя упругими модулями. Кроме того, в работе [5] не использовался метод быстро сходящихся решеточных сумм. Применительно к двухслойным системам, насколько нам известно, вопрос о пьезоэлектрическом механизме ориентации вигнеровского кристалла ранее не рассматривался.

Симметрия решетки классического вигнеровского кристалла определяется минимумом его кулоновской энергии. В монослойной системе минимум достигается для гексагональной решетки [7]. В двухслойной системе при одинаковой плотности электронов в слоях возможно образование пяти типов электронных решеток. Структура, динамические свойства и критерии плавления таких систем были подробно изучены в работах [8–10]. Квантовые двухслойные вигнеровские кристаллы во внешнем магнитном поле были рассмотрены в работах [11,12]. Возможность образования двух-

слойных вигнеровских кристаллов в сверхтекучих гелиевых пленках изучалась в работах [13,14].

В классическом двухслойном вигнеровском кристалле переход между различными кристаллическими фазами регулируется параметром  $\eta = d\sqrt{n}$ , где  $d$  — расстояние между слоями,  $n$  — плотность электронов в слое. Случай  $\eta = 0$  соответствует монослойной системе с удвоенной плотностью, а случай  $\eta = \infty$  — системе двух невзаимодействующих слоев. В обоих случаях минимуму энергии отвечают гексагональные решетки с периодом, отличающимся в  $\sqrt{2}$  раз. Поэтому при конечных  $\eta$  возникают переходные фазы: прямоугольная, квадратная и ромбическая.

Пьезоэлектрическое взаимодействие, вообще говоря, может привести к сдвигу границ между фазами. В GaAs пьезоэлектрическое взаимодействие достаточно слабое, поэтому указанный эффект будет малым. Тем не менее, поскольку кулоновское взаимодействие в системе с кубической симметрией решетки изотропно, учет пьезоэлектрической поправки к взаимодействию между электронами важен для определения ориентации электронного кристалла.

## 2. Энергия пьезоэлектрического взаимодействия между электронами в вигнеровском кристалле

Рассмотрим безграничную пьезоэлектрическую среду. Электростатический потенциал электрона  $\Phi$ , помещенного в начало координат, дается решением следующей системы уравнений:

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{D} &= 4\pi e\delta(0), \\ \partial\sigma_{ik}/\partial x_k &= 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$D_i = -\epsilon_{ik} \frac{\partial\Phi}{\partial x_k} - 4\pi\beta_{i,kl} u_{kl} \quad (2)$$

— вектор электрической индукции,

$$\sigma_{ik} = \lambda_{iklm} u_{lm} - \beta_{l,ik} \frac{\partial\Phi}{\partial x_l} \quad (3)$$

— тензор напряжений. Здесь  $\epsilon_{ik}$  — диэлектрический тензор,  $\lambda_{iklm}$  — тензор упругих модулей,  $\beta_{l,ik}$  — тензор пьезоэлектрических модулей,  $u_{ik}$  — тензор деформаций. После перехода к фурье-компонентам система уравнений (1) сводится к алгебраической и ответ для электростатического потенциала легко может быть выписан. Запишем его в явном виде для кубической системы, свойст-

ва которой определяются тремя упругими модулями  $c_{11}$ ,  $c_{12}$ ,  $c_{44}$ , одним пьезоэлектрическим модулем  $e_{14}$  и диэлектрической константой  $\epsilon$ :

$$\Phi_{\mathbf{q}} = \frac{4\pi e}{\epsilon q^2} - \frac{(4\pi)^2 e}{\epsilon q^2} \chi \frac{P(q_x, q_y, q_z)}{q^8 s_1^2(\mathbf{q}) s_2^2(\mathbf{q}) s_3^2(\mathbf{q}) \rho^3} + O(\chi^2), \quad (4)$$

где  $\chi = e_{14}^2 / \epsilon c_{11}$  — малый параметр, по которому выполнено разложение;  $s_i(\mathbf{q})$  — скорость звука с поляризацией  $i$  в направлении  $\mathbf{q}$ ;  $\rho$  — плотность среды. Функция  $P$  — однородный полином 8-й степени, который имеет вид

$$P(q_x, q_y, q_z) = q^2 \left( a_1 q_x^2 q_y^2 q_z^2 + a_2 \sum_{l \neq k} q_l^4 q_k^2 \right) + a_3 \sum_{l \neq k} q_l^4 q_k^4, \quad (5)$$

где  $l, k = x, y, z$ ,

$$\begin{aligned} a_1 &= c_{11}(2c_{12}^2 - 2c_{11}c_{12} + c_{44}^2 - 2c_{11}c_{44}), \\ a_2 &= c_{11}^2 c_{44}, \\ a_3 &= \frac{1}{2} c_{11}(c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}). \end{aligned} \quad (6)$$

Оси  $x, y, z$  направлены вдоль осей четвертого порядка кристаллической матрицы. Как видно из формулы (4), электростатический потенциал содержит поправку  $\delta\Phi_{\mathbf{q}}$ , наличие которой связано с пьезоэлектрическим взаимодействием. В изотропном кристалле, в котором скорости звука не зависят от направления и коэффициент  $a_3$  в (5) равен нулю, линейную по  $\chi$  поправку можно представить в виде разложения по конечному числу сферических гармоник:

$$\delta\Phi_{\mathbf{q}} = -\frac{(4\pi)^2 e}{\epsilon q^2} \chi \sum_n \sum_{m=-n}^n A_{nm} Y_{nm}(\Theta_{\mathbf{q}}, \Psi_{\mathbf{q}}), \quad (7)$$

где  $n$  — четное и  $n \leq 6$ . В (7)  $\Psi_{\mathbf{q}}$  и  $\Theta_{\mathbf{q}}$  — полярный и азимутальный углы соответственно. Коэффициенты  $A_{nm}$  выражаются через продольную и поперечную скорости звука. Разложение (7) в случае анизотропного кристалла будет содержать и более высокие гармоники, разрешенные симметрией системы. Коэффициенты  $A_{nm}$  для анизотропного случая могут быть найдены численно. Вычисление этих коэффициентов для системы GaAs ( $c_{11} = 12,3 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>,  $c_{12} = 5,7 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>,

$c_{44} = 6,0 \cdot 10^{11}$  дин/см<sup>2</sup>) показывает, что основной вклад в сумму (7) дают те же гармоники ( $n \leq 6$ ), что и в изотропной системе (коэффициенты при высших гармониках по крайней мере на порядок меньше). Необходимо заметить, что, поскольку соотношения между коэффициентами разложения определяются тремя, а не двумя модулями упругости, даже ограничиваясь нижними гармониками, нельзя свести задачу к изотропной.

Используя разложение (7), легко найти поправку к электростатическому взаимодействию между электронами в пьезоэлектрической среде. Выполнив обратное фурье-преобразование, находим

$$\delta V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2 \chi}{\epsilon r} G(\Theta_{\mathbf{r}}, \Psi_{\mathbf{r}}), \quad (8)$$

где

$$G(\Theta_{\mathbf{r}}, \Psi_{\mathbf{r}}) =$$

$$= 4\pi \sum_{nm} A_{nm} (-1)^{n/2} \frac{n!}{2^n [(n/2)!]^2} Y_{nm}(\Theta_{\mathbf{r}}, \Psi_{\mathbf{r}}). \quad (9)$$

Вид функции  $G$ , рассчитанный для кристалла GaAs, показан на рис. 1 (оси координат выбраны вдоль осей четвертого порядка). Как видно из (8), взаимодействие между электронами содержит добавку, отвечающую притяжению, величина которого зависит от направления  $\mathbf{r}$  и спадает как  $1/r$ . Поскольку спадание такое же медленное, как и для кулоновского взаимодействия, решеточ-

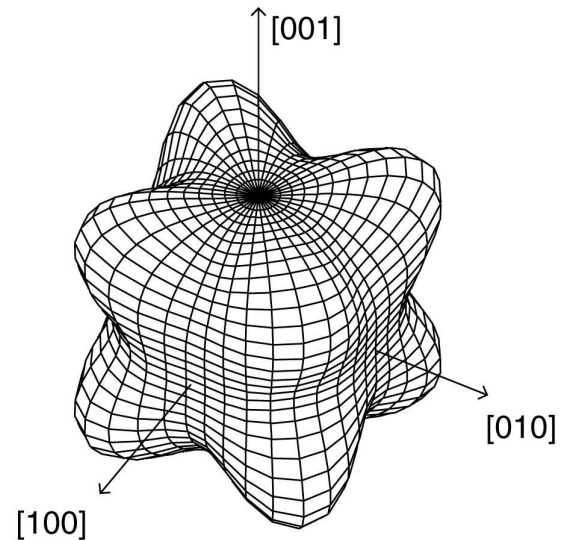


Рис. 1. Анизотропия пьезоэлектрического взаимодействия между электронами в кристалле GaAs.

ные суммы будут сходиться медленно. Поэтому для корректного вычисления пьезоэлектрической поправки к энергии вигнеровского кристалла необходимо использовать метод быстро сходящихся сумм, модифицированный с учетом анизотропии взаимодействия.

Рассмотрим двухслойную электронную систему, помещенную в безграничную пьезоэлектрическую среду и ориентированную нормально некоторому кристаллографическому направлению. В этом случае в выражении (9) удобно перейти к новым углам  $\Theta$  и  $\Psi$ , отсчитываемым от нормали к поверхности электронного слоя и от некоторой оси, лежащей в плоскости слоя, соответственно (при этом общая структура выражения (9) сохранится, изменятся лишь значения коэффициентов разложения). Если считать структуру электронного кристалла заданной, то его ориентация определяется вкладом слагаемых в (9), которые зависят от угла  $\Psi_{\mathbf{r}}$  в выбранной системе отсчета. Последние отвечают гармоникам с  $m \neq 0$ . Для вычисления решеточных сумм перепишем зависящую от  $\Psi_{\mathbf{r}}$  часть взаимодействия между электронами в виде

$$V_{\text{an}}(r, \Theta_{\mathbf{r}}, \Psi_{\mathbf{r}}) = -\frac{e^2\chi}{\epsilon r} \sum_{l \geq 0} \sum_{|m| > 0} B_{lm} \cos^l \Theta_{\mathbf{r}} \sin^{|m|} \Theta_{\mathbf{r}} e^{im\Psi_{\mathbf{r}}}. \quad (10)$$

С использованием явного вида сферических функций коэффициенты  $B_{lm}$  можно выразить через коэффициенты  $A_{nm}$ . Поскольку индекс  $n$  в (7), (9) принимает лишь четные значения, коэффициенты  $B_{lm}$  отличны от нуля только при  $l$  и  $m$ , имеющих одинаковую четность. Если в разложении (9) ограничиться конечным числом сферических гармоник, то сумма (10) также будет содержать конечное число слагаемых. Заметим, что для сохранения точной симметрии по углу  $\Psi$  при учете конечного числа гармоник переход к указанной системе координат следует выполнить в уравнении (4), а затем численно искать значения коэффициентов разложения в (7).

С учетом (10) запишем анизотропную добавку к энергии электронного кристалла в виде

$$E_{\text{an}} = E_{\text{an}}^{\text{in}} + E_{\text{an}}^{\text{out}} + E_{\text{an}}^{\text{BG}}, \quad (11)$$

где

$$E_{\text{an}}^{\text{in}} = -\frac{e^2\chi}{\epsilon} \sum_{|m| > 0} B_{0m} \sum_{\mathbf{R} \neq \mathbf{R}'} \frac{1}{|\mathbf{R} - \mathbf{R}'|} e^{im\Psi_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'}} \quad (12)$$

отвечает вкладу взаимодействия внутри слоев,

$$E_{\text{an}}^{\text{out}} = -\frac{e^2\chi}{\epsilon} \sum_{l \geq 0} \sum_{|m| > 0} B_{lm} \times \times \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} \frac{d^l |\mathbf{R} - \mathbf{R}' - \mathbf{c}|^{|m|}}{[|\mathbf{R} - \mathbf{R}' - \mathbf{c}|^2 + d^2]^{(|m|+l+1)/2}} e^{im\Psi_{\mathbf{R}+\mathbf{c}-\mathbf{R}}} \quad (13)$$

описывает вклад межслойного взаимодействия, а  $E_{\text{an}}^{\text{BG}}$  дает поправку к взаимодействию с положительным компенсирующим фоном. В (12), (13)  $\mathbf{R}, \mathbf{R}'$  – векторы решетки. Вектор  $\mathbf{c}$  задает смещение верхней подрешетки относительно нижней. Решеточные суммы в (12), (13) могут быть сведены к быстро сходящемуся виду при использовании модифицированного варианта метода Эвальда (см. Приложение). Применение этого метода дает

$$E_{\text{an}} = -\frac{Ne^2\chi}{\epsilon} \sqrt{n} (S_{\text{in}} + S_{\text{out}}), \quad (14)$$

где  $N$  – полное число частиц в слое,

$$S_{\text{in}} = \sum_m B_{0m} \left\{ \sum_{\mathbf{R} \neq 0} e^{im\Psi_{\mathbf{R}}} \Phi(m, \pi n R^2) + + i^{|m|} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} e^{im\Psi_{\mathbf{G}}} \Phi\left(m, \frac{G^2}{4\pi n}\right) \right\}, \quad (15)$$

$$S_{\text{out}} = \sum_{lm} B_{lm} \left\{ \sum_{\mathbf{R}} \frac{d^l |\mathbf{R} + \mathbf{c}|^{|m|}}{[|\mathbf{R} + \mathbf{c}|^2 + d^2]^{(|m|+l)/2}} \times \times e^{im\Psi_{\mathbf{R}+\mathbf{c}}} \Phi(l + |m|, \pi n [|\mathbf{R} + \mathbf{c}|^2 + d^2]) + + i^{|m|} \sum_{\mathbf{G} \neq 0} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{c} + im\Psi_{\mathbf{G}}} \Psi\left(l, m, \frac{G^2}{4\pi n}, \pi n d^2\right) \right\}, \quad (16)$$

где  $\mathbf{G}$  – векторы обратной решетки. В (15), (16) введены функции

$$\Phi(m, x) = \sqrt{\pi/x} \frac{\Gamma[(|m| + 1)/2, x]}{\Gamma[(|m| + 1)/2]}, \quad (17)$$

$$\Psi(l, m, x, y) = \frac{1}{2} \sqrt{\pi/x} \frac{1}{\Gamma[(l + |m| + 1)/2]} \times$$

$$\times \sum_{s=0}^{N(l,m)} C_{N(l,m)+s}^{2s} (xy)^{(|m|+l-2s)/4} \left[ e^{-2\sqrt{xy}} F(s, \sqrt{x} - \sqrt{y}) + (-1)^{(l+|m|-2s)/2} e^{2\sqrt{xy}} F(s, \sqrt{x} + \sqrt{y}) \right]. \quad (18)$$

В (18)  $C_i^j$  — биномиальные коэффициенты,  $N(l, m) = \max [ (|m| - l)/2, (l - |m| - 2)/2 ]$ ,

$$F(s, z) = \Gamma(s + 1/2) - \operatorname{sgn}(z) \gamma(s + 1/2, z^2). \quad (19)$$

В (17)–(19)  $\Gamma(x)$  — гамма-функция,  $\Gamma(k, x)$ ,  $\gamma(k, x)$  — неполные гамма-функции. Заметим, что при  $l, m$  равных нулю (эти слагаемые мы не учитываем, так как они дают не зависящую от направления поправку к кулоновскому взаимодействию) суммы (15), (16) сводятся к известным выражениям для изотропного случая [7,8].

### 3. Ориентация двухслойного вигнеровского кристалла в матрице GaAs

Используем результаты предыдущего раздела для определения ориентации двухслойных вигнеровских кристаллов, расположенных в плоскостях (001), (0–11) и (111) в матрице GaAs. Для описания пьезоэлектрического взаимодействия с учетом анизотропии упругих модулей ограничимся учетом гармоник с  $n \leq 18$  и  $|m| \leq 12$  в разложении (7). Заметим, что в рассматриваемых ниже случаях гармоники с  $n > 6$  влияют лишь на ориентацию гексагональных структур в слоях, параллельных плоскости (001), и квадратной структуры в слоях, параллельных плоскости (111). В указанных случаях симметрия системы приводит

к занулению вклада нижних гармоник в энергию вигнеровского кристалла.

Структура вигнеровского кристалла в двухслойной системе задается элементарными векторами решетки  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  и вектором  $\mathbf{c}$  относительного смещения подрешеток в соседних слоях. Значения этих векторов для пяти рассматриваемых типов решеток приведены в таблице. Значения  $\eta$ , при которых происходит изменение симметрии решетки, были получены в работе [8]. Поскольку для дальнейшего рассмотрения необходимы зависимости  $\delta(\eta)$  (для прямоугольной решетки) и  $\alpha(\eta)$  (для ромбической решетки), мы повторили вычисления, выполненные в [8]. Согласно полученным результатам, переход между прямоугольной и квадратной фазами имеет место при  $\eta \approx 0,263$ , между квадратной и ромбической фазами — при  $\eta \approx 0,621$ , между ромбической и двойной гексагональной — при  $\eta \approx 0,732$ . Первые два перехода являются переходами второго рода, а последний — первого рода. Полученные ответы воспроизводят результаты работы [8]. (Мы не анализируем переход между простой гексагональной и прямоугольной фазами, который, согласно [8], имеет место при  $\eta = 0,006$ , поскольку при таком переходе ориентация электронного кристалла меняется несущественно.)

Зависимость анизотропной добавки к энергии двухслойного электронного кристалла от его ориентации в плоскостях (001), (0–11), (111) показана на рис. 2–4 при различных значениях параметра  $\eta$  (энергия дана в пересчете на один электрон в единицах  $e^2\chi\sqrt{n}/2\varepsilon$ ).

Для двумерного вигнеровского кристалла, расположенного в плоскости (001), анизотропная до-

Таблица

Параметры структуры двухслойных вигнеровских кристаллов

Тип решетки	Элементарные векторы прямой решетки		Элементарные векторы обратной решетки		Вектор смещения подрешеток в соседних слоях $\mathbf{c}$	Варьируемый параметр	Электронная плотность
	$\mathbf{R}_1$	$\mathbf{R}_2$	$\mathbf{G}_1$	$\mathbf{G}_2$			
Простая гексагональная	$(a, 0)$	$(0, \sqrt{3}a)$	$(2\pi/a, 0)$	$(0, 2\pi/a\sqrt{3})$	$a/2 (1, \sqrt{3})$	–	$1/a^2\sqrt{3}$
Прямоугольная	$(a, 0)$	$(0, a\delta)$	$(2\pi/a, 0)$	$(0, 2\pi/a\delta)$	$a/2 (1, \delta)$	$1 < \delta < \sqrt{3}$	$1/a^2\delta$
Квадратная	$(a, 0)$	$(0, a)$	$(2\pi/a, 0)$	$(0, 2\pi/a)$	$a/2 (1, 1)$	–	$1/a^2$
Ромбическая	$(a, 0)$	$a(\cos \alpha, \sin \alpha)$	$\frac{2\pi}{a} (1, -\operatorname{ctg} \alpha)$	$(0, \frac{2\pi}{a \sin \alpha})$	$\frac{a}{2} (1 + \cos \alpha, \sin \alpha)$	$\frac{\pi}{3} < \alpha < \frac{\pi}{2}$	$\frac{1}{a^2 \sin \alpha}$
Двойная гексагональная	$(a, 0)$	$(a/2, a\sqrt{3}/2)$	$\frac{2\pi}{a} (1, -1/\sqrt{3})$	$(0, 4\pi/a\sqrt{3})$	$a/2 (1, 1/\sqrt{3})$	–	$2/a^2\sqrt{3}$

бавка к энергии простой гексагональной структуры не превышает  $2 \cdot 10^{-2}$  (в выбранных единицах). Минимум энергии достигается при угле между  $\mathbf{R}_1$  и осью  $[100]$  кратном  $30^\circ$ . Абсолютный минимум энергии прямоугольной фазы соответствует направлению одного из элементарных векторов решетки вдоль оси  $[100]$ . При малых  $\eta$  имеются также локальные минимумы, соответствующие углу  $\beta \approx \pm 30^\circ$  между  $\mathbf{R}_1$  и одной из осей четвертого порядка. При увеличении  $\eta$  локальные минимумы исчезают, а энергия анизотропии существенно возрастает. Минимум энергии квадратной фазы соответствует ориентации элементарных векторов решетки вдоль осей четвертого порядка. Вектор  $\mathbf{c}$

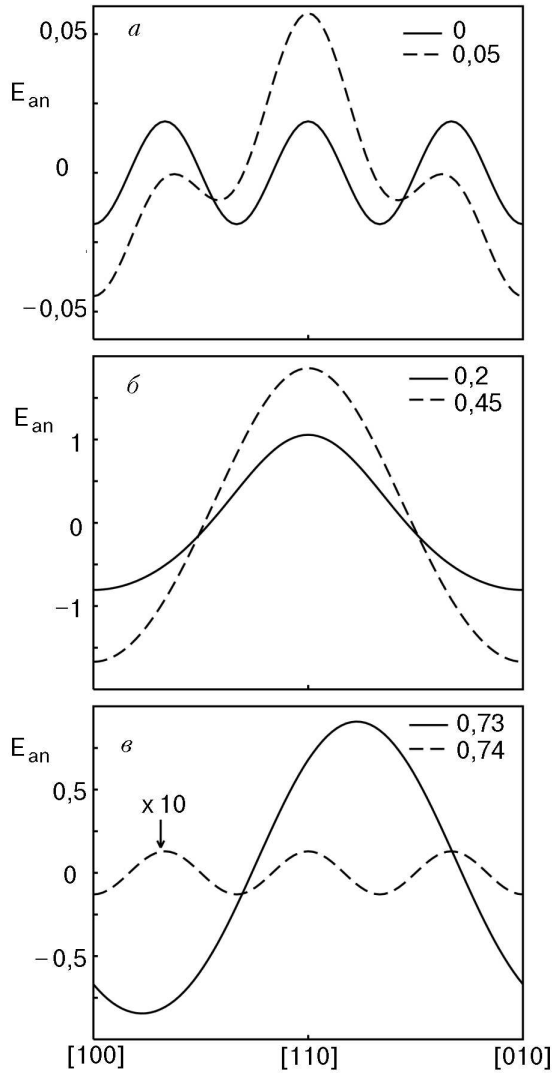


Рис. 2. Зависимость анизотропной части пьезоэлектрической добавки к энергии двухслойного вигнеровского кристалла в плоскости  $(001)$  от направления  $\mathbf{R}_1$  в пересчете на один электрон в единицах  $e^2 \chi \sqrt{n} / 2\epsilon$  для различных значений параметра  $\eta$ : простая гексагональная решетка и прямоугольная решетка при малых  $\eta$  (а); прямоугольная решетка при больших  $\eta$  и квадратная решетка (б); ромбическая и двойная гексагональная решетки вблизи точки перехода I рода (в).

при этом ориентирован вдоль одной из осей второго порядка. Такая же ориентация вектора  $\mathbf{c}$  сохраняется и в ромбической фазе (при изменении  $\eta$  векторы  $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2$  плавно поворачиваются). Переход в гексагональную фазу при дальнейшем увеличении параметра  $\eta$  сопровождается скачкообразным изменением ориентации векторов  $\mathbf{R}_1$  и  $\mathbf{c}$  и резким уменьшением энергии анизотропии.

В случае двумерных электронных слоев, параллельных плоскости  $(0-11)$ , расчет дает следующие результаты. Минимум энергии гексагональных структур достигается при ориентации одного из элементарных векторов решетки вдоль оси  $[100]$ . При увеличении расстояния между сло-

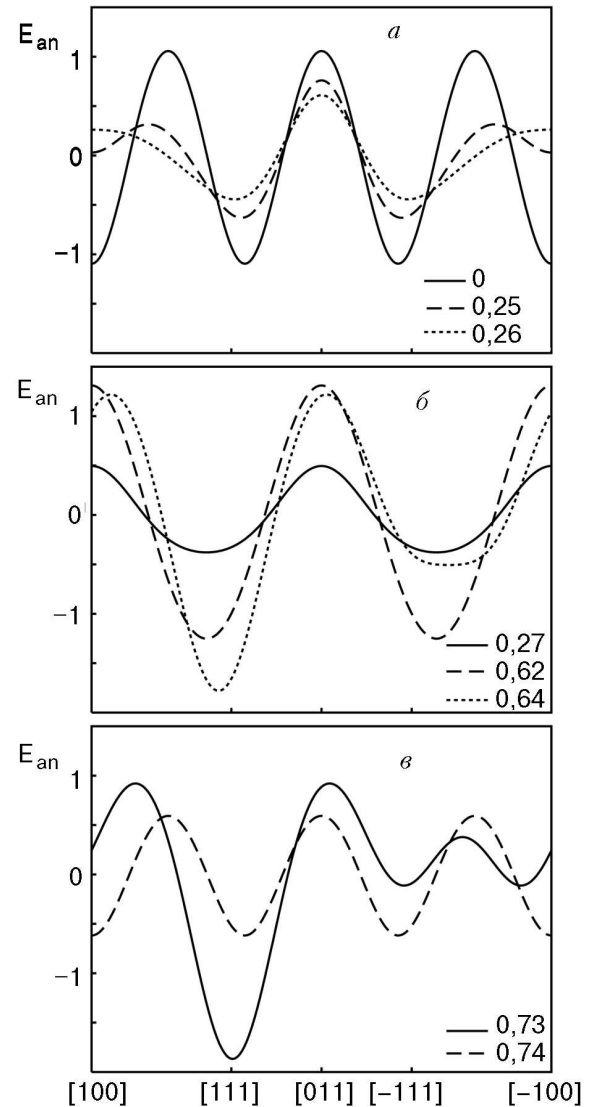


Рис. 3. Анизотропная часть энергии вигнеровского кристалла в плоскости  $(0-11)$  в зависимости от направления  $\mathbf{R}_1$  при различных  $\eta$ : простая гексагональная и прямоугольная решетки (а); квадратная решетка и ромбическая решетка вблизи точки перехода II рода (б); ромбическая и двойная гексагональная решетки вблизи перехода I рода (в).

ями и формировании прямоугольной структуры возникают два положения равновесия, одно из которых соответствует локальному минимуму ( $\mathbf{R}_1$  направлен вдоль оси [100]), а другое — глобальному минимуму ( $\mathbf{R}_1$  направлен под углом  $\beta \approx 60^\circ$  к оси [100] либо  $[-100]$ ). Вблизи точки перехода в квадратную фазу локальный минимум исчезает и происходит быстрая переориентация электронной решетки. Энергия квадратной фазы минимальна при направлении одного из элементарных векторов решетки под углом  $\beta = 45^\circ$  к оси [100], т.е. вектору  $\mathbf{c}$ , параллельному оси [100] либо [011]. После перехода в ромбическую фазу направление вектора  $\mathbf{c}$ , параллельное оси [011],

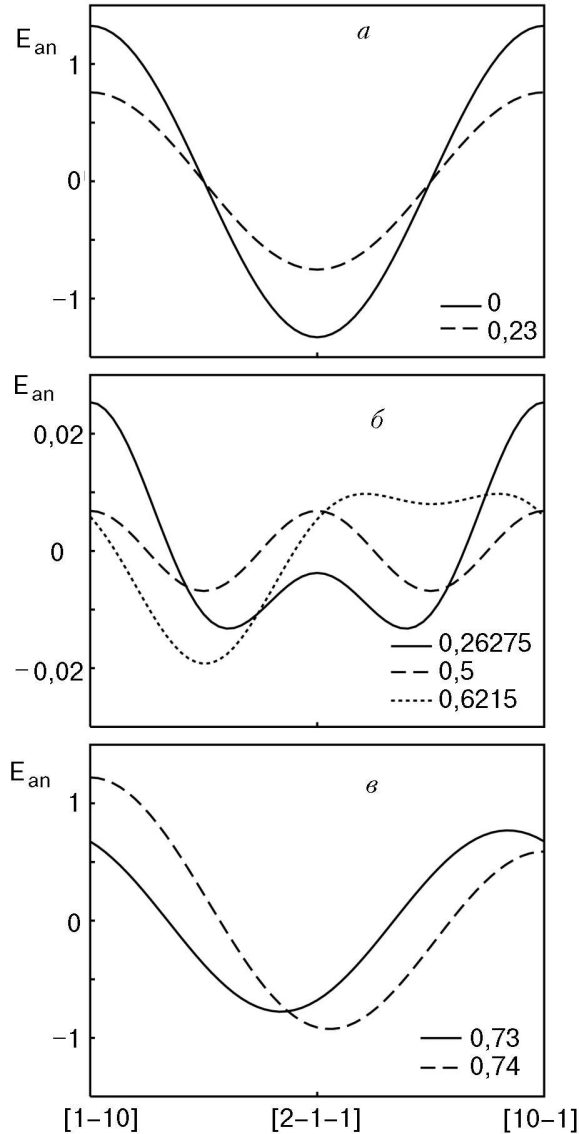


Рис. 4. Анизотропная часть энергии вигнеровского кристалла в плоскости (111) в зависимости от направления  $\mathbf{R}_1$  при различных  $\eta$ : простая гексагональная и прямоугольная решетки (а); прямоугольная и ромбическая решетки вблизи переходов II рода и квадратная решетка (б); ромбическая и двойная гексагональная решетки (в).

соответствует глобальному, а параллельное оси [100] — локальному минимумам. При увеличении  $\eta$  локальный минимум расщепляется на два, соответствующих направлению вектора  $\mathbf{c}$  под углом  $\pm \beta$  ( $\beta < 30^\circ$ ) к этой оси. При переходе в двойную гексагональную фазу все три минимума становятся равными (ориентация  $\mathbf{R}_1$  при таком переходе изменяется скачком).

В двухслойной структуре, расположенной параллельно плоскости (111), минимум энергии простой гексагональной и прямоугольной фаз соответствует направлению  $\mathbf{R}_1$  под углом  $\beta = 30^\circ$  к одной из лежащих в плоскости (111) осей второго порядка. При приближении к точке перехода в квадратную фазу вклад анизотропной добавки резко уменьшается. Вблизи точки перехода происходит резкая переориентация. Для квадратной фазы минимум энергии достигается при направлении  $\mathbf{R}_1$  под углом  $\beta = \pm 15^\circ$  к одной из осей второго порядка. При переходе в ромбическую фазу анизотропия снова возрастает. Энергия ромбической фазы минимальна в случае, когда вектор  $\mathbf{c}$  ориентирован вдоль одной из осей второго порядка. При переходе в двойную гексагональную фазу ориентация вектора  $\mathbf{c}$  меняется скачком — он несколько отклоняется от оси второго порядка. Заметим, что в двойной гексагональной фазе наиболее энергетически выгодная ориентация векторов решетки отличается от случая простой гексагональной фазы. Последнее связано с отсутствием центра инверсии в двойной гексагональной структуре.

Полученные результаты показывают, что ориентация двухслойного вигнеровского кристалла в пьезоэлектрической матрице определяется плоскостью, в которой расположены электронные слои, типом электронной решетки и значением параметра  $\eta$ . Интересно отметить, что скачкообразный характер переориентации наблюдается не только при переходе из ромбической в двухслойную гексагональную фазу (это ожидаемый эффект, поскольку он сопровождается переходом первого рода). Очень быстрая переориентация имеет место и при переходе второго рода из прямоугольной в квадратную фазу.

Величина энергии анизотропии определяется параметром  $\chi$ , который в GaAs порядка  $2 \cdot 10^{-4}$ . Характерная разница между кулоновской энергией различных фаз в пересчете на один электрон составляет величину порядка  $10^{-2} e^2 \sqrt{n} / \epsilon$  [7,8], т.е., согласно приведенным результатам, в рассматриваемой системе пьезоэлектрическое взаимодействие примерно на два порядка меньше и, следовательно, оно слабо влияет на фазовую диа-

грамму, а определяет лишь ориентацию электронного кристалла. Тем не менее в других системах, в которых значение пьезоэлектрического модуля больше, можно ожидать коренной перестройки фазовой картины. Такие эффекты применительно к монослойным системам обсуждались в работе [4]. Рассмотренный в настоящей работе подход позволяет детально изучить такую возможность в случае двухслойных электронных кристаллов.

### Приложение

Преобразуем к быстро сходящемуся виду выражение

$$S_{\pm m} = \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \frac{e^{\pm im\psi_{\mathbf{R}}}}{R}, \quad (\text{П.1})$$

где  $m > 0$ . Введем функцию

$$T_{\pm m}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{R}+\mathbf{r}) \pm im\psi_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}}}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}|} - \frac{e^{\pm im\psi_{\mathbf{r}}}}{r} \quad (\text{П.2})$$

такую, что

$$S_{\pm m} = \lim_{\mathbf{r} \rightarrow 0, \mathbf{q} \rightarrow 0} T_{\pm m}(\mathbf{r}, \mathbf{q}). \quad (\text{П.3})$$

Воспользуемся тождеством

$$\frac{\gamma[(m+1)/2, x] + \Gamma[(m+1)/2, x]}{\Gamma[(m+1)/2]} \equiv 1. \quad (\text{П.4})$$

С учетом (П.4) величину  $T_{\pm m}$  можно записать в виде суммы

$$T_{\pm m}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = T_{\pm m,1}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) + T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}), \quad (\text{П.5})$$

где

$$T_{\pm m,1}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{R} \neq 0} \frac{e^{i\mathbf{q}\mathbf{R} \pm im\psi_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}} \frac{\Gamma[(m+1)/2, \pi n|\mathbf{r} + \mathbf{R}|^2]}{\Gamma[(m+1)/2]}}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}|} - \frac{e^{\pm im\psi_{\mathbf{r}}} \gamma[(m+1)/2, \pi n r^2]}{r \Gamma[(m+1)/2]}, \quad (\text{П.6})$$

$$T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) =$$

$$= e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R}} \frac{e^{i\mathbf{q}(\mathbf{r}+\mathbf{R}) \pm im\psi_{\mathbf{r}+\mathbf{R}}} \gamma[(m+1)/2, \pi n|\mathbf{r} + \mathbf{R}|^2]}{|\mathbf{r} + \mathbf{R}| \Gamma[(m+1)/2]}. \quad (\text{П.7})$$

Заметим, что последнее слагаемое в (П.6) зануляется в пределе  $\mathbf{r} \rightarrow 0$ .

Для преобразования  $T_{\pm m,2}$  подставим в (П.7) определение функции  $\gamma(\alpha, x)$ :

$$T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{2}{\Gamma[(m+1)/2]} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \int_0^{\sqrt{\pi n}} d\xi \xi^m \times \\ \times \sum_{\mathbf{R}} |\mathbf{r} + \mathbf{R}|^m \exp \left[ i\mathbf{q}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \pm im\psi_{\mathbf{r}+\mathbf{R}} - \xi^2 |\mathbf{r} + \mathbf{R}|^2 \right]. \quad (\text{П.8})$$

Разлагая (П.8) в ряд Фурье по векторам обратной решетки, имеем

$$T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \frac{2n}{\Gamma[(m+1)/2]} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r}} \times \\ \times \int_0^{\sqrt{\pi n}} d\xi \xi^m \int d^2 \boldsymbol{\rho} \rho^m \exp \left[ i\boldsymbol{\rho}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \pm im\psi_{\boldsymbol{\rho}} - \xi^2 \rho^2 \right]. \quad (\text{П.9})$$

Вычисляя интеграл по  $\boldsymbol{\rho}$ , находим

$$T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = i^m \frac{2\pi n}{\Gamma[(m+1)/2]} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r} \pm im\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}} \times \\ \times \left( \frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|}{2} \right)^m \int_0^{\sqrt{\pi n}} d\xi \frac{1}{\xi^{m+2}} \exp \left( -\frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2}{4\xi^2} \right). \quad (\text{П.10})$$

Используя замену переменных  $\xi = |\mathbf{q} + \mathbf{G}|/2t$ , приходим к виду

$$T_{\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = i^m \frac{2\pi n}{\Gamma[(m+1)/2]} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r} \pm im\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}} \times \\ \times \frac{1}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \Gamma \left( \frac{m+1}{2}, \frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2}{4\pi n} \right). \quad (\text{П.11})$$

Подставляя в (12) формулы (П.1), (П.3), (П.7), (П.11) и вводя функцию (17), приходим к уравнению (15). Член с  $\mathbf{G} = 0$  в (П.11) выпадает, поскольку он сокращается с внутрислойным взаимодействием с положительным компенсирующим фоном, входящим в  $E_{\text{ан}}^{BG}$ .

Аналогично преобразуется сумма

$$S_{l,\pm m} = \sum_{\mathbf{R}} \frac{d^l |\mathbf{R} + \mathbf{c}|^m e^{\pm im\psi_{\mathbf{R}+\mathbf{c}}}}{(|\mathbf{R} + \mathbf{c}|^2 + d^2)^{(l+m+1)/2}}. \quad (\text{П.12})$$

При этом также используется тождество (П.4) с заменой в нем  $m$  на  $m+l$ . Имеем



$$S_{l,\pm m} = T_{l,\pm m,1}(0, 0) + \lim_{\mathbf{r} \rightarrow 0, \mathbf{q} \rightarrow 0} T_{l,\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}), \quad (\text{П.13})$$

где

$$T_{l,\pm m,1}(0, 0) = \sum_{\mathbf{R}} \frac{d^l |\mathbf{R} + \mathbf{c}|^m e^{\pm im\psi_{\mathbf{R}+\mathbf{c}}}}{(|\mathbf{R} + \mathbf{c}|^2 + d^2)^{(l+m+1)/2}} \times \\ \times \frac{\Gamma[(l+m+1)/2, \pi n(|\mathbf{R} + \mathbf{c}|^2 + d^2)]}{\Gamma[(l+m+1)/2]}. \quad (\text{П.14})$$

Величина  $T_{l,\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q})$  после перехода к суммированию по  $\mathbf{G}$  и выполнению интегрирования по  $\mathbf{p}$  сводится к виду

$$T_{l,\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = i^m \frac{2\pi n}{\Gamma[(l+m+1)/2]} \times \\ \times \sum_{\mathbf{G}} \exp[-i\mathbf{G}\mathbf{c} - i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r} \pm im\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}] d^l \times \\ \times \left(\frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|}{2}\right)^m \int_0^{\sqrt{\pi n}} d\xi \xi^{l-m-2} \exp\left(-\xi^2 d^2 - \frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|^2}{4\xi^2}\right). \quad (\text{П.15})$$

Вычисление интеграла в (П.15) дает

$$T_{l,\pm m,2}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \\ = i^m \frac{\pi n}{\Gamma[(l+m+1)/2]} \sum_{\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\mathbf{c} - i(\mathbf{q}+\mathbf{G})\mathbf{r} \pm im\psi_{\mathbf{q}+\mathbf{G}}} \times \\ \times \frac{1}{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|} \sum_{s=0}^{N(l,m)} C_{N(l,m)+s}^{2s} \left(\frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|d}{2}\right)^{(m+l-2s)/2} \times \\ \times \left\{ e^{-|\mathbf{q}+\mathbf{G}|d} \left[ \Gamma\left(s + \frac{1}{2}\right) - \text{sgn}(f_-) \gamma\left(s + \frac{1}{2}, f_-^2\right) \right] + \right. \\ \left. + (-1)^{(l+m-2s)/2} e^{|\mathbf{q}+\mathbf{G}|d} \Gamma\left(s + \frac{1}{2}, f_+^2\right) \right\}, \quad (\text{П.16})$$

где

$$f_{\pm} = \frac{|\mathbf{q} + \mathbf{G}|}{2\sqrt{\pi n}} \pm \sqrt{\pi n} d, \quad (\text{П.17})$$

$$N(l, m) = \max\left(\frac{m-l}{2}, \frac{l-m-2}{2}\right). \quad (\text{П.18})$$

При выводе (П.16) учтено то, что в рассматриваемой задаче параметры  $l$  и  $m$  имеют одинаковую четность. Слагаемое с  $\mathbf{G} = 0$  в (П.16) компенсируется взаимодействием с положительным фоном соседнего слоя. Используя (П.13), (П.14), (П.16), можно записать вклад межслойного взаимодействия в форме (16).

1. L. Brey, H. A. Fertig, R. Cote, and A. H. McDonald, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 2562 (1995).
2. A. A. Koulakov, M. M. Fogler, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 499 (1996); M. M. Fogler, A. A. Koulakov, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev.* **B54**, 1853 (1996).
3. M. P. Lilly, K. B. Cooper, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 394 (1999); R. R. Du, D. C. Tsui, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Solid State Commun.* **109**, 389 (1999).
4. Э. И. Рашба, Е. Я. Шерман, *ФТП* **21**, 1957 (1987).
5. Е. Я. Sherman, *Phys. Rev.* **B52**, 1512 (1995).
6. Д. В. Филь, *ФHT* **26**, 792 (2000).
7. L. Bonsall and A. A. Maradudin, *Phys. Rev.* **B15**, 1959 (1977).
8. G. Goldoni and F. M. Peeters, *Phys. Rev.* **B53**, 4591 (1996).
9. I. V. Schweigert, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 5293 (1999).
10. I. V. Schweigert, V. A. Schweigert, and F. M. Peeters, *Phys. Rev.* **B60**, 14665 (1999).
11. L. Zheng and H. A. Fertig, *Phys. Rev.* **B52**, 12282 (1995).
12. S. Narasimhan and T. L. Ho, *Phys. Rev.* **B52**, 12291 (1995).
13. Ю. М. Вильк, Ю. П. Монарха, *ФHT* **10**, 886 (1984).
14. Ю. М. Вильк, Ю. П. Монарха, *ФHT* **11**, 971 (1985).

## The piezoelectric mechanism of orientation of a double layer Wigner crystal in the GaAs host matrix

D. V. Fil

The mechanism of orientation of double layer classical Wigner crystals in a piezoelectric medium is considered. For the GaAs system a correction to the electrostatic interaction between electrons caused by the piezoelectric effect is calculated. It is shown that this correction results in a dependence of the total energy of the electron crystal on its orientation relative to the crystallography axes of the host matrix. The Ewald method is generalized for the calculation of the anisotropic interaction between electrons in a Wigner crystal. This method is used to calculate the energy of the double layer Wigner crystals versus their orientation and the interlayer distance in the electron layers parallel to the (001), (0-11) and (111) crystallographic planes. The most energetically preferable orientation of all types of the double layer electron lattices is found. It is shown that in the double layer Wigner crystal the phase transitions between the structures of different lattice symmetry may be accompanied by a change of their orientation.