Письма в ЖЭТФ, том 63, вып.3, стр.209 - 213

АНИЗОТРОПИЯ ДЫРОЧНОГО МАГНИТНОГО ПОЛЯРОНА В ПОЛУМАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Т.Л.Линник, Ю.Г.Рубо, В.И.Шека

Институт физики полупроводников НАН Украины, 252028 Киев, Украина

Поступила в редакцию 11 января 1996 г.

Показано, что форма дырочного магнитного полярона в полумагнитных полупроводниках со структурой цинковой обманки является анизотропной: полярон сильно сплюснут в направлении его магнитного момента. При учете анизотропии дырочного спектра свойства полярона начинают зависеть от ориентации его спина относительно кристаллографических осей. В частности, энергия связи полярона максимальна в случае, когда спин направлен вдоль оси [111].

PACS 72.20.-i, 71.38.+i

Достаточно сильное обменное взаимодействие носителя с магнитными ионами в полумагнитном полупроводнике (ПМП) может приводить к образованию магнитного полярона, то есть кластера с большим суммарным спиновым моментом ионов, в котором локализован носитель [1–3]. Факт существования таких объектов в ПМП является в настоящее время хорошо экспериментально установленным. Как равновесные, так и динамические свойства магнитных поляронов наблюдались с использованием различных экспериментальных методик (см. [4] и литературу к этой статье). Отметим, в частности, что магнитополяронный эффект приводит к большому красному сдвигу линии экситонной люминесценции в $Cd_{1-x}Mn_xTe$, наблюдаемой при селективном возбуждении [5]. Очень убедительным свидетельством, с нашей точки зрения, является также наблюдение возникновения магнитного момента в полумагнитных кристаллах малых размеров при возбуждении в них экситонов циркулярно поляризованным светом [6].

Образование экситонного магнитного полярона связано, главным образом, с обменным взаимодействием дырки с магнитными ионами, поскольку константа этого взаимодействия в 4–5 раз превосходит константу электрон-ионного обмена во всех исследованных к настоящему времени ПМП [7] и эффективные массы дырок также значительно больше электронных. В случае свободной дырки (при отсутствии притягивающего дырку потенциала немагнитной природы) гамильтониан, описывающий дырочный магнитный полярон в ПМП со структурой цинковой обманки ($Cd_{1-x}Mn_xTe$, $Zn_{1-x}Mn_xSe$), имеет вид

$$H = H_L(\hat{\mathbf{k}}) + \frac{1}{3}\beta \sum_n (\mathbf{J}\mathbf{S}_n)\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + H_{i-i}. \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{S}_n$ – спины ионов Mn^{2+} ($S_n = 5/2$), расположенных в точках $\mathbf{R}_n$, $\mathbf{r}$ и $\mathbf{J}$ – координата и оператор спина дырки ($J = 3/2$), β – обменная константа, а H_{i-i} – антиферромагнитное взаимодействие спинов ионов друг с другом. Первое слагаемое в (1) есть гамильтониан Латтинжера [8] ($\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$):

$$H_L(\hat{\mathbf{k}}) = \frac{\hbar^2}{m_0}\left[\frac{1}{2}(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2)\hat{\mathbf{k}}^2 - \gamma_3(\mathbf{J}\hat{\mathbf{k}})^2 + (\gamma_3 - \gamma_2)J_i^2\hat{k}_i^2\right], \tag{2}$$

где m_0 – масса свободного электрона, γ_1, γ_2 и γ_3 – параметры Латтинжера, а нижний индекс i нумерует три проекции соответствующего вектора на кубические оси [100], [010] и [001] (по таким индексам в случае повторения, как в (2), подразумевается суммирование). В имеющихся расчетах свойств свободного магнитного полярона в объеме ПМП [2, 9–11] кинетическая энергия носителя описывалась обычным, не зависящим от спина и квадратичным по $\mathbf{k}$, слагаемым, соответствующим одной простой параболической зоне; исключение составляет работа [12]. В данном сообщении мы показываем, что в представляющем, с экспериментальной точки зрения, интерес в случае дырочного полярона использование правильной формы кинетической энергии (2), описывающей наличие двух ветвей спектра (легкие и тяжелые дырки), приводит к качественным изменениям в виде волновой функции дырки и, соответственно, в форме магнитного полярона.

Равновесное состояние системы (1) находится минимизацией свободной энергии, которая в адиабатическом приближении вычисляется как свободная энергия, соответствующая зависящему только от спинов ионов гамильтониану $H_s = \langle\Psi_h|H|\Psi_h\rangle$, где $|\Psi_h\rangle$ – волновая функция, описывающая финитное движение дырки. В работе [12], где рассматривался предельный случай стремящегося к нулю отношения масс легких и тяжелых дырок, эта волновая функция выбиралась сферически-симметричной и имеющей специальный вид, позволяющий исключить из среднего значения $H_L(\hat{\mathbf{k}})$ слагаемые с массой легкой дырки. При таком виде волновой функции, однако, средний спиновый момент дырки оказывается меньше 3/2, что приводит к эффективному ослаблению обменного взаимодействия дырки с ионами. В случае магнитного полярона сильной связи, когда собственно и годится адиабатическое приближение, спины находящихся в дырочной орбите ионов складываются в большой, классический момент, определенным образом направленный в пространстве, и волновую функцию дырки более естественно искать в виде, соответствующем максимально возможной проекции ее спина на это направление. Именно,

$$|\Psi_h\rangle = \psi(\mathbf{r})|\chi(\mathbf{c})\rangle, \tag{3}$$

где $\psi(\mathbf{r})$ – чисто координатная волновая функция, а $|\chi(\mathbf{c})\rangle$ – спинор, описывающий состояние спина дырки с проекцией +3/2 на ось, задаваемую единичным вектором $\mathbf{c}$ (ось, по которой направлен суммарный магнитный момент полярона): $(\mathbf{Jc})|\chi(\mathbf{c})\rangle = (3/2)|\chi(\mathbf{c})\rangle$. При этом свободная энергия системы может быть представлена в виде

$$F = \mathcal{K} + \int d^3r\, f(\psi^2(\mathbf{r})), \qquad \mathcal{K} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\int d^3r \left(\frac{\partial\psi}{\partial r_i}\right) g_{ij} \left(\frac{\partial\psi}{\partial r_j}\right). \tag{4}$$

Здесь $\mathcal{K}$ есть средняя кинетическая энергия дырки, а второй член – свободная энергия подсистемы магнитных ионов в обменном поле дырки. Тензор g_{ij}, входящий в выражение (4), вычисляется с использованием соотношения $\langle\chi(\mathbf{c})|(\mathbf{Jd})^2|\chi(\mathbf{c})\rangle = 3(2(\mathbf{cd})^2 + \mathbf{d}^2)/4$, где $\mathbf{d}$ – произвольный, не зависящий от $\mathbf{J}$, вектор, и равен

$$g_{ij} = \left(\gamma_1 + \gamma_2 + 3(\gamma_3 - \gamma_2)c_i^2\right)\delta_{ij} - 3\gamma_3 c_i c_j. \tag{5}$$

Возможность образования магнитного полярона определяется в результате соревнования между положительной кинетической энергией $\mathcal{K}$ и отрицательным вторым слагаемым в (4) (обменная энергия). Если r_0 – характерный размер волновой функции дырки, то $\mathcal{K}$ растет как r_0^{-2} с уменьшением r_0. В то же время, плотность обменной энергии $f(\psi^2(\mathbf{r}))$ при больших r_0 ведет себя пропорционально $\psi^4(\mathbf{r})$, поскольку она определяется произведением обменного поля дырки ($\propto \psi^2$) на плотность среднего спина, также пропорционального ψ^2 при малых ψ. Следовательно, при слабой локализации дырки обменная энергия уменьшается как $-r_0^{-3}$. В результате свободная энергия F положительна при больших r_0 и проходит через максимум, а затем уменьшается с уменьшением r_0. В случае сильного обменного взаимодействия и/или большой концентрации магнитных ионов свободная энергия становится отрицательной в области малых r_0 и имеет там минимум, которым и определяется равновесное состояние полярона. Наличие этого минимума (а не коллапса полярона) связано с насыщением магнитного момента ионов, так что плотность спинового момента ионов перестает зависеть от ψ, и $f \propto \psi^2$ при больших ψ. Для невзаимодействующих магнитных ионов явный вид $f(\psi^2(\mathbf{r}))$ приведен, например, в [13]. Мы не будем в дальнейшем использовать какой-либо конкретный вид функции $f(\psi^2(\mathbf{r}))$, однако будем предполагать, что плотность обменной энергии определяется только ψ^2 и не содержит градиентных членов. Это справедливо в случае, когда r_0 значительно превосходит все корреляционные длины подсистемы магнитных ионов.

Как следует из (4) и (5), свободная энергия магнитного полярона существенно зависит от формы волновой функции дырки. Для нахождения оптимальной (в смысле минимальности $\mathcal{K}$) формы выберем систему координат таким образом, чтобы симметричный тензор g_{ij} (5) приводился в ней к главным осям. Тогда волновая функция $\psi(\mathbf{r})$, минимизирующая функционал (4), имеет в этой системе общий вид:

$$\psi(\mathbf{r}) = r_0^{-3/2}\varphi\left(\sqrt{\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2}}\right); \qquad r_0^3 = a_x a_y a_z. \tag{6}$$

Подстановка (6) в (4) дает

$$\mathcal{K} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \cdot 4\pi \int_0^\infty \rho^2 d\rho \left(\frac{d\varphi}{d\rho}\right)^2 \cdot \frac{1}{3}\left(\frac{g_x}{a_x^2} + \frac{g_y}{a_y^2} + \frac{g_z}{a_z^2}\right), \tag{7}$$

где g_x, g_y, g_z – главные значения тензора g_{ij}. В то же время, обменная энергия зависит от локализационных длин a_x, a_y, a_z лишь через их среднее геометрическое r_0. Минимизируя (7) по этим параметрам при условии $a_x a_y a_z = r_0^3 = \mathrm{const}$ (то есть при постоянной обменной энергии), получим

$$a_x^2 = \left(\frac{g_x^2}{g_y g_z}\right)^{1/3} r_0^2, \qquad a_y^2 = \left(\frac{g_y^2}{g_z g_x}\right)^{1/3} r_0^2, \qquad a_z^2 = \left(\frac{g_z^2}{g_x g_y}\right)^{1/3} r_0^2; \tag{8}$$

при этом

$$\mathcal{K}_{min} = \frac{\hbar^2}{2m^*(\mathbf{c})} \cdot 4\pi \int_0^\infty \rho^2 d\rho \left(\frac{d\varphi}{d\rho}\right)^2; \qquad m^*(\mathbf{c}) = [\mathrm{Det}(g)]^{-1/3} m_0; \tag{9}$$

$$\mathrm{Det}(g) = (\gamma_1 + \gamma_2)^2(\gamma_1 - 2\gamma_2) - 9(\gamma_1 + \gamma_2)(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(\xi^2\eta^2 + \eta^2\zeta^2 + \zeta^2\xi^2) - \\ -27(2\gamma_3 + \gamma_2)(\gamma_3 - \gamma_2)^2\xi^2\eta^2\zeta^2. \tag{10}$$

В формуле (10) через ξ, η, ζ обозначены проекции единичного вектора c, задающего ориентацию спина магнитного полярона на кубические оси. Экстремальное значение $\mathcal{K}_{min}$ совпадает с тем, которое получилось бы в случае одной простой параболической зоны с эффективной массой m^* при выборе координатной части волновой функции дырки в сферически-симметричном виде $r_0^{-3/2}\varphi(r/r_0)$. Отметим, что тензор g_{ij}, определяющий эту массу, пропорционален тензору обратных эффективных масс дырки в ПМП в магнитном поле (направленном вдоль c), приводящем к гигантскому спиновому расщеплению валентных подзон, а $m^*(\mathrm{c})$ совпадает с эффективной массой плотности состояний дырки для этого случая (см. [14]).

Таким образом, при произвольной ориентации спинового момента магнитного полярона по отношению к кристаллографическим осям волновая функция дырки имеет вид трехосного эллипсоида и такую же форму имеет область существенной поляризации спинов ионов. Соотношение осей этого эллипсоида целиком определяется главными значениями тензора (5), то есть параметрами Латтинжера. Эффективная масса, которая определяет свободную энергию полярона, заметно изменяется с направлением полного спина полярона. Так для $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ с $\gamma_1 = 5.29$, $\gamma_2 = 1.89$, $\gamma_3 = 2.46$ (параметры теллурида кадмия [15]), $m^*(\mathrm{c})$ изменяется от $0.23m_0$ при $\mathrm{c}\|[001]$ до $0.36m_0$ при $\mathrm{c}\|[111]$. Поэтому следует ожидать существенной зависимости таких свойств магнитного полярона, как средняя энергия и величина магнитного момента, от ориентации последнего. Возможность исследования этих зависимостей связана с тем, что направление спина полярона может задаваться экспериментальными условиями (например, циркулярной поляризацией возбуждающего экситоны света [6]). Это связано с тем, что переориентация спина полярона происходит за значительно большие времена, чем время образования полярона и время его жизни [16].

Поскольку обычно $\gamma_3 > \gamma_2$, то наиболее предпочтительной ориентацией спина полярона является, как следует из (9) и (10), направление пространственной диагонали куба (например, [111]). В этом случае форма полярона представляет собой эллипсоид вращения, ось вращения которого (ось z) параллельна направлению спина. Главные значения тензора g_{ij} равны $g_z = \gamma_1 - 2\gamma_3$, $g_x = g_y = \gamma_1 + \gamma_3$, а локализационные длины в продольном, $a_\| = a_z$, и поперечном, $a_\perp = a_x = a_y$, направлениях соотносятся согласно (8) как

$$\frac{a_\|}{a_\perp} = \left(\frac{\gamma_1 - 2\gamma_3}{\gamma_1 + \gamma_3}\right)^{1/2}. \tag{11}$$

Для приведенных выше параметров $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ это отношение составляет 0.22. Магнитный полярон имеет такую же форму и в случае, когда его спин направлен вдоль одной из кубических осей (например, [001]); при этом соответствующее отношение локализационных длин получается заменой γ_3 на γ_2 в (11).

Важно подчеркнуть, что такая анизотропная форма полярона сохраняется и в случае сферически-симметричного спектра дырки ($\gamma_3 = \gamma_2$). Хотя при этом свойства полярона уже, естественно, перестают зависеть от направления c, полярон имеет форму блина, перпендикулярного направлению его спинового момента. Физическая причина этого связана с тем, что в состоянии магнитного полярона фиксируется направление спина дырки, и это приводит к анизотропии ее динамических свойств. Именно скорость затухания волновой функции в параллельном спину дырки направлении определяется эффективной массой тяжелой дырки, в то время как в поперечном направлении – величиной, близкой к эффективной массе легкой дырки. Отметим также в заключение, что анизотропия формы полярона должна сохраняться и для локализованных сторонним потенциалом поляронов, хотя степень анизотропии в этом случае будет зависеть от характеристик потенциала.

Анизотропная форма волновой функции основного состояния в сферически симметричной поляронной задаче не является спецификой магнитного полярона. Подобная ситуация возникает и в близкой проблеме сильного взаимодействия дырки с оптическими фононами, когда также применимо адиабатическое приближение [17].

Авторы выражают благодарность Ю.Г.Семенову за полезное обсуждение работы.

---

1. М.А.Кривоглаз, УФН **111**, 617 (1973).
2. С.М.Рябченко, Ю.Г.Семенов, ФТТ **26**, 3347 (1984).
3. P.A.Wolff, In: *Semiconductors and Semimetals*, Eds. J.K.Furdyna and J.Kossut, Academic Press, London, 1988, **25**, p.413.
4. T.Dietl, P.Peyla, W.Grieshaber, and Y.Merle d'Aubigné, Phys. Rev. Lett. **74**, 474 (1995).
5. G.Mackh, W.Ossau, D.R.Yakovlev et al., Phys. Rev. B **49**, 10248 (1994).
6. D.D.Awschalom, J.Warnock, and S. von Molnár, Phys. Rev. Lett. **58**, 812 (1987).
7. R.R.Galazka, Materials Science Forum **182-184**, 371 (1995).
8. J.M.Luttinger, Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
9. C.Benoit à la Guillaume, Phys. Stat. Sol.(b) **175**, 369 (1993).
10. C.Benoit à la Guillaume, Yu.G.Semenov, and M.Combescot, Phys. Rev. B **51**, 14124 (1995).
11. Ю.Г.Кусраев, А.В.Кудинов, ФТТ **36**, 2088 (1994).
12. Ю.Ф.Берковская, Б.Л.Гельмонт, Э.И.Цидильковский, ФТП **22**, 855 (1988).
13. A.V.Kavokin and K.V.Kavokin, Semicond.Sci.Technol. **8**, 191 (1993).
14. Ю.Г.Семенов, ФТП **19**, 2047 (1985).
15. P.Lawaetz, Phys. Rev. B **4**, 3460 (1971).
16. И.А.Меркулов, Д.Р.Яковлев, К.В.Кавокин и др., Письма в ЖЭТФ **62**, 313 (1995).
17. Ф.В.Кусмарцев, Э.И.Рашба. В сб. *Теоретико-групповые методы в физике*, Труды Международного семинара, Звенигород, 1982, т.2. М.: Наука, 1983, с.453. In: *Cooperative Phenomena*, Proc. Intern. Symp. "Synergetics and Cooperative Phenomena in Solids and Macromolecules", Tallinn, 1982. Tallinn: Valgus, 1983, p.193.