1995 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 29, N 4

РАССЕЯНИЕ ДЫРОК НА ФОНОНАХ В ФЕРРОМАГНИТНОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ $HgCr_2Se_4$

Н.Г.Бебенин

Институт физики металлов Уральского отделения
Российской академии наук, Екатеринбург, Россия
(Получена 12 апреля 1994 г. Принята к печати 21 сентября 1994 г.)

Вычислено время релаксации импульса дырок в магнитном полупроводнике $HgCr_2Se_4$ при их рассеянии на акустических фононах в ферромагнитной области температур. Показано, что анизотропные вклады в проводимость появляются не только из-за того, что эффективные массы дырок зависят от ориентации намагниченности, но и потому, что такую зависимость имеет и вероятность рассеяния.

Проводимость ферромагнетиков в упорядоченной фазе зависит от направления намагниченности относительно кристаллографических осей. Обычно такую зависимость представляют в виде формального ряда по степеням $\mathbf{n}$ — единичного вектора вдоль направления спонтанного магнитного момента. Для кубического кристалла первые члены этого ряда можно записать следующим образом:

$$\sigma_{ij} = (\sigma_1 + \sigma_2 n_i^2)\delta_{ij} + \sigma_3(1 - \delta_{ij})n_i n_j, \tag{1}$$

где $i, j = x, y, z$, координатные оси направлены вдоль осей 4-го порядка, константы σ_1, σ_2 и σ_3 зависят от параметров кристалла, который считается намагниченным однородно. Зачастую зависимость проводимости от $\mathbf{n}$ незначительна. Одним из исключений из этого правила является ферромагнитный полупроводник $HgCr_2Se_4$ p-типа проводимости, в котором величина магнитосопротивления изменяется при варьировании направления намагниченности на десяток и более процентов. Теория этого эффекта [1] была построена в предположении, что наиболее существенным является рассеяние дырок на короткодействующем потенциале, когда вероятность рассеяния не зависит от $\mathbf{n}$, и вклады в σ_2 и σ_3 появляются только благодаря наличию соответствующей зависимости в тензоре эффективных масс дырок. В [2] было, однако, показано, что изменение энергии дырки при деформировании кристалла зависит от ориентации намагниченности. Это означает, что при рассеянии на акустических фононах, которое всегда имеется, должны существовать вклады в σ_2 и σ_3, обусловленные наличием зависимости от $\mathbf{n}$ вероятности фононного рассеяния. Цель настоящей работы заключается в оценке величины этого эффекта.

1. В парамагнитной области температур волновые функции потолка валентной зоны $HgCr_2Se_4$ преобразуются по представлению Γ_8 группы O_h^7, величина спин-орбитально расщепления Δ составляет, по-видимому, около 0.2 эВ [3]. В ферромагнитной области обменное взаимодействие зонных носителей с локализованными магнитными моментами хрома расщепляет зону Γ_8 на 4 невырожденные подзоны, причем величина обменного расщепления $\Delta_{\text{ex}} \ll \Delta$ [1,4]. При достаточном удалении от точки Кюри $T_c = 110$ K основная часть дырок находится в верхней подзоне «тяжелых дырок», рассмотрением которой можно ограничиться. Спектр дырок в этой подзоне имеет вид [1,4]

$$E(\mathbf{k}) = \sum_{ij} \left(\frac{\hbar^2}{2M}\right)_i k_i k_j = (\gamma_1 + \gamma_2)k^2 - 3\gamma_2(n_x^2 k_x^2 + n_y^2 k_y^2 + n_z^2 k_z^2) -$$

$$- 6\gamma_3(n_x n_y k_x k_y + n_x n_z k_x k_z + n_y n_z k_y k_z), \tag{2}$$

где $\hat{M}$ — тензор эффективных масс, γ_α — параметры Латтинджера, определенные согласно [5]. Энергию дырки в деформированном кристалле в пренебрежении изменением эффективных масс можно представить в виде

$$E_u(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k}) + \Delta E(\hat{u}), \tag{3}$$

где $\hat{u}$ — тензор деформации, а выражение для ΔE получается из (2) формальной заменой $\gamma_1 \to -a$, $\gamma_2 \to -b/2$, $\gamma_3 \to -d/2\sqrt{3}$, $k_i k_j \to u_{ij}$, где a, b и d — деформационные константы, определенные обычным образом [5],

$$\Delta E(\hat{u}) = -\left(a + \frac{b}{2}\right) u + \frac{3}{2} b(n_x^2 u_{xx} + n_y^2 u_{yy} + n_z^2 u_{zz}) +$$

$$+ \sqrt{3} d(n_x n_y u_{xy} + n_x n_z u_{xz} + n_y n_z u_{yz}), \tag{4}$$

$$u = u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}.$$

Чтобы найти оператор взаимодействия с фононами H_{int}, нужно в (4) подставить известное выражение для вектора упругих смещений $\mathbf{u}$ в точке $\mathbf{r}$:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}\nu} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}\nu} V_c}} \mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu} \left[b_{\mathbf{q}\nu} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} + b_{\mathbf{q}\nu}^+ e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}\right], \tag{5}$$

где ρ — плотность кристалла, V_c — его объем, $\omega_{\mathbf{q}\nu} = s_\nu q$ — частота фонона ν-й ветви с волновым вектором $\mathbf{q}$, s_ν — скорость продольных ($\nu \equiv L$) и поперечных ($\nu \equiv T_{1,2}$) упругих волн, $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\nu}$ — вектор поляризации, $b_{\mathbf{q}\nu}^+$ и $b_{\mathbf{q}\nu}$ — операторы рождения и уничтожения фононов. Из (4) и (5) следует выражение для оператора взаимодействия

$$H_{\text{int}} = i \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\nu} U_{\mathbf{q}\nu} \left[a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}\nu} - a_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^+ a_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{q}\nu}^+\right], \tag{6}$$

где, например, для продольных фононов

$$U_{\mathbf{q}L}=\sqrt{\frac{\hbar q}{2\rho s_L V_c}}\left[-\left(a+\frac{b}{2}\right)+\frac{3}{2}b(\mu_x^2n_x^2+\mu_y^2n_y^2+\mu_z^2n_z^2)+\right.$$

$$\left.+\sqrt{3}d(\mu_x\mu_yn_xn_y+\mu_x\mu_zn_xn_z+\mu_y\mu_zn_yn_z)\right], \qquad (7)$$

$\boldsymbol{\mu}=\mathbf{q}/q$, $a^+_{\mathbf{k}}$ и $a_{\mathbf{k}}$ — операторы рождения и уничтожения дырок. Для поперечных фононов выражение для $U_{\mathbf{q}T}$ оказыватеся более громоздким, но в общем имеет такой же вид. Главное отличие состоит в том, что поскольку для поперечных колебаний $u=0$, первое слагаемое в квадратных скобках в формуле (7) отсутствует, так что $U_{\mathbf{q}T}$ содержит члены только второго порядка по $\mathbf{n}$.

2. Чтобы вычислить проводимость, воспользуемся известной формулой

$$\sigma_{ij}(\omega)=\frac{1}{V_c}\int\limits_{-\infty}^{0}dt\mathrm{e}^{(\varepsilon-i\omega)t}\left(J_i,J_j(t)\right),$$

где $\varepsilon\to+0$, ω — частота, $\mathbf{J}$ — оператор тока, $A(t)=\mathrm{e}^{iHt/\hbar}A\mathrm{e}^{-iHt/\hbar}$, $H=H_0+H_{\mathrm{int}}$, H_0 — гамильтониан свободных дырок,

$$(A,B)=\int\limits_0^{\beta}d\lambda\langle AB(i\hbar\lambda)\rangle,$$

$\beta=T^{-1}$, T — температура в энергетических единицах, $<\ldots>$ означает усреднение по ансамблю. Записывая цепочку уравнений для функций Грина $G_{ij}=\theta(-t)\mathrm{e}^{\varepsilon T}(J_i,J_j(t))$ или каким-либо другим способом, легко убедиться в том, что с точностью до 2-го порядка по взаимодействию фурье-образ $G_{ij}(\omega)$ можно представить в виде

$$G_{ij}(\omega)=(J_i,J_j)\left[\left(\varepsilon-i\omega+\sum(\omega)\right)^{-1}\right]_{j'j}, \qquad (9)$$

где

$$\sum_{ij}(\omega)=\left[(\mathbf{J},\mathbf{J})^{-1}\right]_{ij'}\int\limits_{-\infty}^{0}dt\mathrm{e}^{(\varepsilon-i\omega)t}\left(\dot J_{j'},\dot J_j(t)\right)_0, \qquad (10)$$

$\dot A=\frac{1}{i\hbar}[A,H]$, посредством $[(\mathbf{J},\mathbf{J})^{-1}]_{ij}$ обозначены элементы матрицы, обратной (J_i,J_j), $(\ldots)_0$ означает использование усреднения с гамильтонианом H_0. Скорость дырки можно выразить через ее импульс,

$$v_i=(M^{-1})_{ij}p_j. \qquad (11)$$

Используя тождество Кубо, легко показать, что

$$(J_i,J_j)=e^2n_pV_c\left[M^{-1}\right]_{ij}, \qquad (12)$$

где n_p — концентрация дырок. Подставляя (11) и (12) в (8)–(10) и устремляя частоту к нулю, для статической проводимости получаем

$$\sigma_{ij} = e^2 n_p [g^{-1}]_{ij}, \tag{13}$$

где

$$g_{ij} = \frac{1}{n_p V_c} \int\limits_{-\infty}^{0} dt e^{\varepsilon t} \left(\dot{P}_i, \dot{P}_j(t) \right)_0, \tag{14}$$

P — оператор импульса дырок. После вычисления коммутаторов и интегралов по λ и t получаем

$$g_{ij} = \frac{2\pi}{n_p V_c} \sum_{\mathbf{kq}\nu} q_i q_j U_{q\nu}^2 \frac{f[E(\mathbf{k})]}{\omega_{\mathbf{q}\nu}} \delta\left[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q})\right], \tag{15}$$

где $f[E(\mathbf{k})]$ — функция распределения дырок; предполагается, что носители тока являются невырожденными и что для актуальных значений $\mathbf{q}$ выполняется условие $\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu} \ll T$. Отметим, что в (15) отсутствует суммирование по спину, так как спиновое вырождение снято обменным взаимодействием зонных носителей с локализованными спинами.

3. Рассмотрим сначала вклад продольных фононов. Подставляя (7) в (15), получаем

$$g_{ij} = \frac{1}{n_p V_c} \sum_{\mathbf{kq}} q_i q_j \frac{\pi\hbar}{\rho s_L^2 V_c} \left[-\left(a + \frac{b}{2}\right) + \frac{3}{2} b (\mu_x^2 n_x^2 + \mu_y^2 n_y^2 + \mu_z^2 n_z^2) + \right.$$
$$\left. + \sqrt{3} d (\mu_x \mu_y n_x n_y + \mu_x \mu_z n_x n_z + \mu_y \mu_z n_y n_z) \right]^2 \times$$
$$\times f[E(\mathbf{k})] \delta\left[E(\mathbf{k}) - E(\mathbf{k}+\mathbf{q})\right]. \tag{16}$$

Очевидно, можно написать

$$\hat{g} = \hat{g}^{aa} + \hat{g}^{ab} + \hat{g}^{ad} + \hat{g}^{bb} + \hat{g}^{dd} + \hat{g}^{bd}, \tag{17}$$

где $\hat{g}^{aa} \sim (a + b/2)^2$, $\hat{g}^{ab} \sim (a + b/2)b$ и т.д. Найдем $\hat{g}^{aa}$. Удобно перейти в систему координат, орты которой являются собственными векторами матрицы $\hat{M}^{-1}$. В этой системе

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k_1^2}{2M_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2M_2} + \frac{\hbar^2 k_3^2}{2M_3}, \tag{18}$$

где константы M_α находятся с помощью уравнения

$$\lambda^3 - 3\gamma_2 \lambda^2 + g(\gamma_2^2 - \gamma_3^2) P \lambda - 27(\gamma_2 - \gamma_3)^2 (\gamma_2 + 2\gamma_3) Q = 0, \tag{19}$$

в котором $\lambda = \gamma_1 + \gamma_2 - \hbar^2/2M_\alpha$, $P = n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2$, $Q = n_x^2 n_y^2 n_z^2$. Очевидно, M_α зависят от $\mathbf{n}$ только через $P(\mathbf{n})$ и $Q(\mathbf{n})$. Тензор $\hat{g}^{aa}$

в указанной системе координат также является диагональным. Для его вычисления удобно сделать замену переменных: $\bar{k}_\alpha = \hbar k_\alpha/\sqrt{2M_\alpha}$, $\bar{g}_\alpha = \hbar q_\alpha/\sqrt{2M_\alpha}$, $\alpha = 1, 2, 3$, после чего суммы по k и q легко вычисляются. Результат получается следующий:

$$\hat{g}^{aa} = \begin{pmatrix} M_1/\tau^{aa} & 0 & 0 \\ 0 & M_2/\tau^{aa} & 0 \\ 0 & 0 & M_3/\tau^{aa} \end{pmatrix}, \tag{20}$$

где

$$\frac{1}{\tau^{aa}} = \frac{8\sqrt{2}}{3\pi^{3/2}} \frac{(a+b/2)^2 m_d^{3/2} T^{3/2}}{\hbar^4 \rho s_L^2}, \tag{21}$$

$m_d = (\det\hat{M})^{1/3}$ — эффективная масса плотности состояний, зависящая от $P(\mathbf{n})$ и $Q(\mathbf{n})$. Разложение $(\tau^{aa})^{-1}$ в ряд по степеням $\mathbf{n}$ начинается не с квадратичных членов, фигурирующих в (1), а с членов 4-го порядка, поэтому зависимость τ^{aa} от $\mathbf{n}$ учитывать не нужно, как и наличие такой зависимости в n_p. Учитывая, что $\gamma_2^* = \gamma_2/\gamma_1 \ll 1$ и $\gamma_3^* = \gamma_3/\gamma_1 \ll 1$ [1], вместо m_d следует использовать $m^* = \hbar^2/2\gamma_1$. Как показано в [6], m^* примерно равна половине массы свободного электрона.

В лабораторной системе координат $g_{ij}^{aa} = M_{ij}/\tau^{aa}$.

Перейдем к вычислению других слагаемых, фигурирующих в (17). Все они зависят от $\mathbf{n}$ уже благодаря наличию такой зависимости в вероятности перехода, поэтому в законе дисперсии следует полагать $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2/2m^*$. Вычисления можно вести непосредственно в лабораторной системе координат. Результат имеет вид

$$g_{ij}^{aa} + g_{ij}^{ab} + g_{ij}^{ad} = \frac{1}{\tau^{aa}} M_{ij} -$$

$$- \frac{3}{10\pi} \frac{m^*}{\tau^{aa}} \frac{b}{a+b/2} (1 + 2n_i^2)\delta_{ij} - \frac{\sqrt{3}}{5\pi} \frac{m^*}{\tau^{aa}} \frac{d}{a+b/2} (1 - \delta_{ij}) n_i n_j. \tag{22}$$

Слагаемые $\hat{g}^{bb} + \hat{g}^{dd} + \hat{g}^{bd}$ учитывать не нужно, так как они приводят к членам 4-го порядка по $\mathbf{n}$.

Рассмотрим поперечные фононы. Поскольку $U_{\mathbf{q}T}$ содержит слагаемые только 2-го порядка по $\mathbf{n}$, вклад поперечных колебаний — величина 4-го порядка, который мы не учитываем. Следовательно, в σ_1, σ_2 и σ_3 существен вклад только продольных фононов.

Обращая матрицу (22), получаем

$$\sigma_{ij} = \sigma_0^{aa} \left\{ \left[1 + \gamma_2^* - 3\gamma_2^* n_i^2 + \frac{3}{10\pi} \frac{b}{a+b/2} (1 + 2n_i^2) \right] \delta_{ij} - \right.$$

$$\left. - (1 - \delta_{ij}) n_i n_j \left[3\gamma_3^* - \frac{\sqrt{3}}{5\pi} \frac{d}{a+b/2} \right] \right\}, \tag{23}$$

где $\sigma_0^{aa} = e^2 n_p \tau^{aa}/m^*$. Сравнивая (1) и (23), находим

$$\sigma_1/\sigma_0^{aa} = 1 + \gamma_2^* + \frac{3}{10\pi}\frac{b}{a+b/2},$$

$$\sigma_2/\sigma_0^{aa} = -3\gamma_2^* + \frac{3}{5\pi}\frac{b}{a+b/2},$$

$$\sigma_3/\sigma_0^{aa} = -3\gamma_3^* + \frac{\sqrt{3}}{5\pi}\frac{d}{a+b/2}. \qquad (24)$$

При выводе этих формул мы для простоты предполагали, что члены, пропорциональные γ_2^*, γ_3^*, b и d, малы по сравнению с единицей. В $HgCr_2Se_4$, $\gamma_2^* \approx 0.11$, $\gamma_3^* \approx 0.07$ [1], так что указанное приближение является законным. Что касается деформационных констант, то нет оснований полагать b и d малыми по сравнению с a, однако в последних слагаемых формул (24) имеются малые численные множители.

Из (24) видно, что вклады в анизотропию проводимости от анизотропии эффективных масс и анизотропии рассеяния на продольных акустических фононах могут оказаться одного порядка. Этот вывод верен, однако, только если фононное рассеяние является преобладающим. Как показывают оценки, в этом случае при 77 K время релаксации дырок есть величина порядка 10^{-12} с, в то время как обычно оно порядка 10^{-14} с (см., например, [6]). Эффекты, обусловленные анизотропией фононного рассеяния, оказываются, таким образом, подавленными. Если будут получены более качественные монокристаллы p-$HgCr_2Se_4$, то эти эффекты могут быть обнаружены по кажущемуся изменению параметров Латтинджера с ростом совершенства образцов.

Список литературы

[1] V.A. Kostylev, B.A. Gizhevskii, A.A. Samokhvalov, M.I. Auslender, N.G. Bebenin. Phys. St. Sol. (b), **158**, 307 (1990).
[2] М.И. Ауслендер, Н.Г. Бебенин. ФТП, **24**, 1169 (1990).
[3] T. Kambara, T. Oquchi, K.I. Gondeira. J. Phys. C, **13**, 1493 (1980).
[4] М.И. Ауслендер, Н.Г. Бебенин. ФТП, **30**, 945 (1988).
[5] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., 1972).
[6] Н.Н. Лошкарева, Н.Г. Бебенин, Б.А. Гижевский, Ю.П. Сухоруков, А.А. Самохвалов. ФТТ, **34**, 3285 (1992).

Редактор Л.В. Шаронова

Hole-phonon scattering in a ferromagnetic $HgCr_2Se_4$ semiconductor

N.G. Bebenin

Institute of Physics, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 620219 Yekaterinburg, Russia