АВТОЛОКАЛИЗАЦИЯ ЭКСИТОНА В КВАНТОВОЙ ЯМЕ С ПОЛУМАГНИТНЫМ БАРЬЕРОМ

Кавокин А. В., Кавокин К. В.

Задача о магнитной автолокализации экситона в квантовой яме решалась вариационным методом в адиабатическом приближении. Показано, что свободный магнитный полярон существует в квантовой яме при температурах ниже некоторой критической, определяемой параметрами ямы. Рассчитана энергия связи магнитного полярона для квантовой ямы CdTe/$Cd_{1-x}Mn_xTe$. Сравниваются условия образования магнитного полярона в пространствах разной размерности.

1. Задача о магнитной автолокализации электронов и дырок в объемном полумагнитном полупроводнике рассматривалась в ряде работ [1-3]. В частности, было установлено, что автолокализация становится энергетически выгодной лишь при температуре ниже критической (T_c), причем энергия связи свободного магнитного полярона (FMP) как функция температуры в точке T_c испытывает разрыв. Однако для реальных объемных полупроводников рассчитанные значения T_c не превышают нескольких десятых градуса, что делает наблюдение FMP на эксперименте затруднительным. В то же время были основания ожидать, что пространственная локализация экситона в квантовой яме по одной из координатных осей приведет к значительному повышению T_c.

Вопрос о магнитном поляроне в квантовой яме обсуждался в теоретических работах [5-7]. При этом внимание было сосредоточено на втягивании экситонной волновой функции в полумагнитный барьер за счет обменного взаимодействия для экситона, связанного на флуктуации [5, 6] и автолокализованного в плоскости [7], при больших значениях поляронной энергии. При этом условия возникновения магнитной автолокализации экситона в плоскости квантовой ямы не обсуждались и вопрос о критической температуре образования FMP оставался открытым. В недавно опубликованной экспериментальной работе [4] сообщается о наблюдении FMP в квантовой яме CdTe/CdMnTe при температуре 1.6 K. В данной работе исследуются условия возникновения и температурная зависимость параметров FMP применительно к такой квантовой яме.

Структуры CdTe/CdMnTe характерны большой величиной отношения высот барьеров в зоне проводимости и валентной зоне [7], что приводит к сильному проникновению дырочной волновой функции в полумагнитный барьер при пренебрежимо малом проникновении электронной. Это позволяет при расчетах пренебрегать вкладом электронного спина в обменную энергию взаимодействия со спинами ионов Mn^{2+}, тем более что обменная константа для дырки в CdMnTe в 4 раза превышает электронную. Сильное деформационное расщепление валентной зоны позволяет решать задачу об автолокализации экситона в приближении простых зон, полагая проекцию спина дырки J на ось полярона, которая совпадает (из-за деформационного расщепления) с осью z, равной $\pm 3/2$.

В данной работе мы пользовались также принятым в большинстве работ адиабатическим приближением, т. е. предполагали, что дырка находится на наинизшем из зеемановских подуровней, расщепленных обменным полем ионов Mn^{2+}. Кроме того, предполагалось, что энергия пространственной локализации для дырки много больше энергии связи полярона, и, следовательно, волновая функция дырки симметрична относительно центра квантовой ямы, а глубина ее проникновения в барьер определяется исключительно параметрами ямы, а не поляронным эффектом. Оценки показывают, что при ширине ямы больше двух монослоев такое приближение вполне оправдано.

2. Характеристики полярона мы вычисляли вариационным методом, минимизируя его свободную энергию $F=K(r_0)+\hat{F}(r_0, T)$, где K — кинетическая энергия экситона и $\hat{F}$ — свободная энергия ионов Mn в обменном поле дырки. Вариационным параметром служил r_0 — радиус волновой функции экситона в плоскости ямы.

В соответствии с нашим предположением о том, что искажение волновой функции дырки по оси z за счет поляронного эффекта пренебрежимо мало, пробную волновую функцию можно записать как произведение $\varphi(z)\Psi(r)$. В дальнейшем при численных расчетах мы будем считать $\varphi(z)$ экспоненциальной в барьере, а $\Psi(r)$ — гауссовой.

Соответственно кинетическая энергия будет выглядеть как сумма продольной и поперечной составляющих:

$$K=K_{\parallel}+K_{\perp},\quad \text{где}\quad K_{\parallel}=-\frac{\hbar^2}{2m_{hh}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dz\varphi^*(z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}\varphi(z)=\mathrm{const}(r_0, T),$$

$$K_{\perp}=-\frac{\hbar^2}{2m^{\perp}}\int\limits_0^{\infty} 2\pi r dr\Psi^*(r)\Delta_r\Psi(r), \tag{1}$$

где m_{hh} — масса тяжелой дырки, $m^{\perp}=m_e+m_h^{\perp}$, m_e — масса электрона, $m_h^{\perp}=4\left(\frac{1}{m_{hh}}+\frac{3}{m_{lh}}\right)^{-1}$, m_{lh} — масса легкой дырки. Переходя к безразмерному радиусу $\rho=\frac{r}{r_0}$, получаем

$$K_{\perp}=-\frac{\hbar^2}{2m^{\perp}r_0^2}\int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho\Psi_0^*(\rho)\Delta_\rho\Psi_0(\rho)=\frac{\hbar^2}{2m^{\perp}r_0^2},\quad \text{где}\quad \Psi_0(\rho)=r_0\Psi(r_0\rho),$$

$$k=-\int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho\Psi_0^*(\rho)\Delta_\rho\Psi_0(\rho). \tag{2}$$

Обменная часть свободной энергии в пренебрежении антиферромагнитным взаимодействием есть сумма свободных энергий всех ионов Mn в обменном поле дырки:

$$\hat{F}=\sum_i(-K_BT\ln Z_i),\quad \text{где}\quad Z_i=\frac{1}{2S+1}\sum_{m=-s}^{s}\exp\left(\frac{\frac{1}{3}\beta m J\,|\Psi(r_i)|^2|\varphi(z_i)|^2}{K_BT}\right) \tag{3}$$

— статсумма i-го иона ($s=5/2$ — спин марганца, $\beta/3$ — константа обменного взаимодействия).

В континуальном приближении заменяем суммирование по ионам Mn^{2+} интегрированием по объему (N_0x — концентрация Mn):

$$\hat{F}=-K_BTN_0x2\int\limits_{L_z/2}^{\infty}dz\int\limits_0^{\infty}2\pi r dr\ln\frac{1}{2s+1}\sum_{m=-s}^{s}\exp\left(\frac{\frac{1}{3}\beta mJ\,|\Psi(r)|^2|\varphi(z)|^2}{k_BT}\right)=$$

$$=-2K_BTr_0^2z_0N_0x\int\limits_0^{\infty}2\pi\rho d\rho\int\limits_0^{\infty}d\xi\ln\frac{1}{2s+1}\sum_{m=-s}^{s}\exp\left(\frac{\frac{1}{3}\beta mJ\,|\Psi_0(\rho)|^2|\varphi_0(\xi)|^2}{z_0r_0^2K_BT}\right). \tag{4}$$

Здесь мы ввели

$$\xi=\frac{z-L_z/2}{z_0},\qquad \varphi_0(\xi)=\frac{\sqrt{z_0}\,\varphi(z-L_z/2)}{\sqrt{\gamma}}, \tag{5}$$

где z_0 — глубина проникновения дырки в барьер,

$$\gamma = 2 \int\limits_{L_z/2}^{\infty} |\varphi(z)|^2 dz = \frac{1+\cos(\sigma L_z)}{1+\cos(\sigma L_z) + \varkappa L_z + \frac{\varkappa}{\sigma}\sin(\sigma L_z)}$$

имеет смысл вероятности нахождения дырки в барьере, где

$$\sigma = \frac{\sqrt{2m_{hh}E^h}}{\hbar}, \quad \varkappa = \frac{\sqrt{2m^{hh}(V^h - E^h)}}{\hbar},$$

здесь V^h — высота барьера в валентной зоне, E^h — энергия уровня размерного квантования тяжелой дырки в квантовой яме.

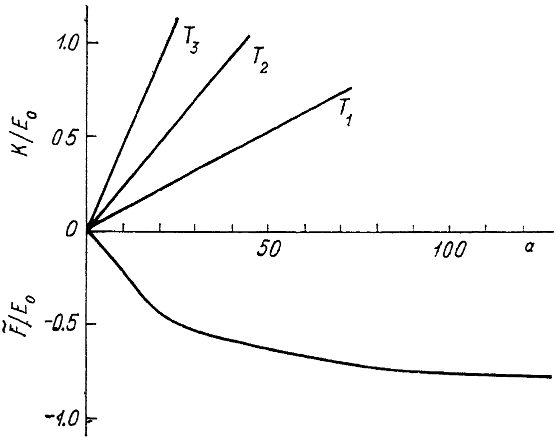

Рис. 1. Зависимость кинетической энергии K и обменной части свободной энергии $\tilde{F}$ от безразмерного параметра $a = \beta\gamma Js/3r_0^2 z_0 K_B T$.
E_0 — энергия связи магнитного полярона при $T=0$. $T_1 < T_2 < T_3$.

Удобно перейти к безразмерному вариационному параметру $a = \beta\gamma Js/3r_0^2 z_0 K_B T$. Тогда обменная часть свободной энергии перепишется как

$$\tilde{F}(a) = -\frac{2}{3}\beta\gamma J s N_0 x \frac{1}{a}\int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \int\limits_0^{\infty} d\xi \ln \frac{1}{2s+1}\sum_{m=-s}^{s} \exp\left(\frac{m}{s}|\Psi_0(\rho)|^2 |\varphi_0(\xi)|^2 a\right). \quad (6)$$

Выразим через a также и $K_\perp$:

$$K_\perp = \frac{\hbar^2}{2m^\perp r_0^2} k = \frac{K_B T z_0 k}{\frac{1}{3}\beta\gamma J s}\frac{\hbar^2}{2m^\perp} a. \quad (7)$$

Исследуем поведение $\tilde{F}(a)$ в предельных случаях.

При $a \to \infty$

$$\tilde{F} = -\frac{2}{3}\beta\gamma J s N_0 x \frac{1}{a}\int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \int\limits_0^{\infty} d\xi |\Psi_0(\rho)|^2 |\varphi_0(\xi)|^2 a = -{}^1/_3\beta\gamma J s N_0 x = -E_0, \quad (8)$$

где E_0 — энергия связи полярона при $T=0$, когда все спины ионов марганца ориентированы обменным полем.

При малых a

$$\tilde{F}(a) \approx -\frac{2}{3}E_0 \int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \int\limits_0^{\infty} d\xi \frac{1}{2s+1}\frac{1}{2}\sum_{m=-s}^{s}\left(\frac{m}{s}\right)^2 |\Psi_0(\rho)|^4 |\varphi_0(\xi)|^4 a^2 = -a\frac{s+1}{3s}\eta E_0,$$

где $$\eta = \int\limits_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \int\limits_0^{\infty} d\xi |\Psi_0(\rho)|^4 |\varphi_0(\xi)|^4 \left(\sum_{m=-s}^{s} m^2 = \frac{1}{3}s(s+1)(2s+1)\right). \quad (9)$$

На рис. 1 приведены зависимости $\tilde{F}$ и $k_\perp$ от a. Видно, что свободная энергия $F=k+\tilde{F}$ имеет минимум при a, отличных от 0 (т. е. при конечных радиусах), только когда выполнено условие $T < T_c$, где

$$K_B T_c = \frac{s+1}{3s}\,\frac{\eta}{k}\,\frac{\left(\frac{1}{3}\,\beta J s N_0\right)^2 x\gamma^2}{\frac{\hbar^2}{2m^\perp}\,N_0 z_0}. \tag{10}$$

При $T=T_c$ энергия полярона обращается в 0, а его радиус — в бесконечность.

Построив путем численного взятия интеграла зависимость $\tilde{F}(a)$, для каждой температуры найдем оптимальное значение $a=a_0$.

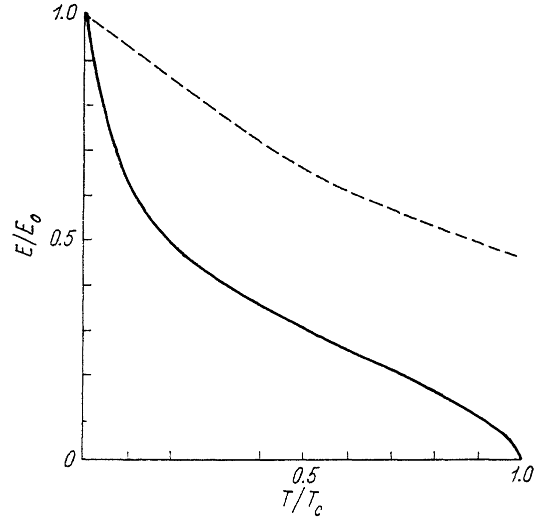

Рис. 2. Зависимость энергии связи FMP от температуры.

T_c — критическая температура разрушения FMP, E_0 — энергия связи FMP при $T=0$. Штрихами показана аналогичная зависимость для трехмерного FMP [3].

Энергию можно выразить через a_0 следующим образом:

$$E = \frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)}\left(\frac{1}{T}F\right)\Bigg|_{r_0=r_0^{\mathrm{opt}}} = K_\perp + \frac{\partial}{\partial\left(\frac{1}{T}\right)}\left(\frac{1}{T}\tilde{F}\right)\Bigg|_{r_0=r_0^{\mathrm{opt}}} = \left(K_\perp(a) + \frac{\partial}{\partial a}\left(a\hat{F}(a)\right)\right)\Bigg|_{a=a_0} =$$

$$= \hat{F}(a_0) + a\,\frac{\partial F}{\partial a}\Bigg|_{a=a_0} = \tilde{F}(a_0). \tag{11}$$

Здесь использованы условие экстремума $\frac{\partial F}{\partial a}\Big|_{a=a_0}=0$ и линейная зависимость кинетической энергии от a.

На рис. 2 приведена универсальная зависимость безразмерной энергии связи полярона E/E_0 от безразмерной температуры T/T_c. Нетрудно показать, что при T, стремящейся к T_c, энергия связи обращается в 0 как $(T_c-T)^{1/2}$. На рис. 3 изображена зависимость безразмерного обратного радиуса локализации R_0/r_0, где R_0 — константа, $\frac{\hbar^2}{2m^\perp R_0^2}=\frac{s+1}{3s}\,\frac{\eta}{k}E_0$.

Видно, что r_0 обращается в бесконечность при $T=0$ и $T=T_c$. В первом случае волновая функция дырки при любой конфигурации поляризует ионы Mn^{2+} по всему пространству. Следовательно, выгодно равномерно размазать ее, устремив r_0 в бесконечность, тем самым обращая в 0 кинетическую энергию. Во втором случае радиус локализации обращается в бесконечность при стремлении к 0 поляронной энергии.

На рис. 4 приведены зависимости критической температуры и E_0 от ширины квантовой ямы $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$. При этом функции $\Psi_0(\rho)$ и $\varphi_0(\xi)$ брались в виде

$$\varphi_0(\xi) = e^{-\xi}, \quad \Psi_0(\rho) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\, e^{-\rho^2}. \tag{12}$$

Использовались параметры $V^h = 50$ мэВ, $x = 0.10$:

$$N_0 = 1.472 \cdot 10^{-2}\,\text{Å}^{-3}, \quad \beta N_0 = 880\ \text{мэВ}.$$

Обсудим теперь условия применимости адиабатического приближения для двумерного FMP. При $T \to T_c$ $E \to 0$, и, вообще говоря, нельзя считать, что дырка находится на одном зеемановском подуровне в обменном поле ионов Mn^{2+}. Однако, как видно из рис. 2, 4, при реальных параметрах ям поляронная энергия E сравнивается с $K_B T_c$ лишь при $\frac{T_c - T}{T_c} \leqslant 10^{-2}$, т. е. адиабатическое приближение применимо практически во всей области существования FMP.

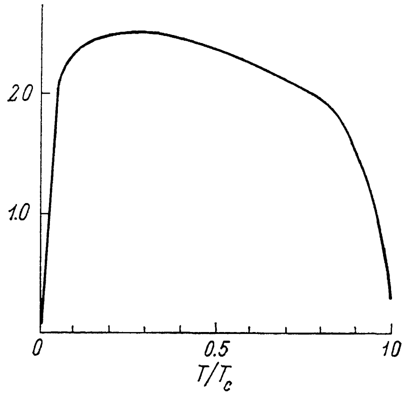

Рис. 3. Зависимость безразмерного обратного радиуса локализации FMP R_0/r_0 от температуры.

$R_0 = \left(\frac{3s}{s+1}\frac{k}{\eta}\frac{\hbar^2}{2m^{\perp}E_0}\right)^{1/2}$, T_c — критическая температура разрушения FMP.

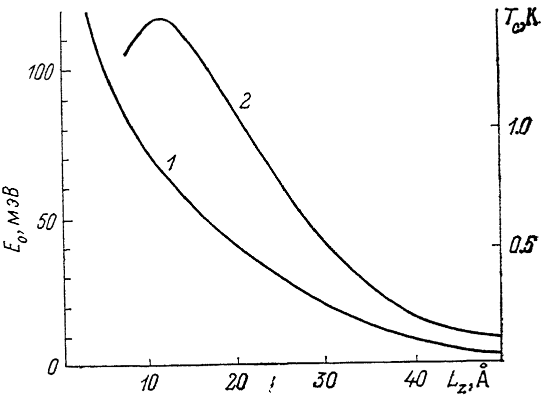

Рис. 4. Зависимость энергии связи FMP при нулевой температуры E_0 (*1*) и критической температуры разрушения FMP T_c от ширины ямы L_z (*2*).

3. В данной работе расчеты температурной зависимости энергии связи магнитного полярона выполнены для парамагнитной фазы $Cd_{1-x}Mn_xTe$, что ограничивает их применимость при составах $x > 0.15$, когда система ионов Mn^{2+} переходит в спин-стекольную фазу. Однако важнейшая характеристика FMP — критическая температура T_c — выражается через магнитную восприимчивость системы ионов Mn^{2+}. Действительно, вблизи T_c, когда радиус полярона велик и обменное поле, создаваемое дыркой на ионах марганца, мало, можно записать свободную энергию как

$$F = K - \frac{1}{2}\chi \int d^3\mathbf{r} H_{\text{ex}}^2, \tag{13}$$

$$H_{\text{ex}} = \frac{\frac{1}{3}\beta J\, |\Psi(r)|^2\, |\varphi(z)|^2}{\mu_B g_{\text{Mn}}}$$

— обменное поле, создаваемое дыркой, χ — магнитная восприимчивость, μ_B — магнетон Бора, g_{Mn} — g-фактор иона марганца. Отсюда видно, что системе выгодно понизить свою свободную энергию за счет локализации экситона при

$$\chi > \chi_c = 2\frac{k}{\eta}\frac{\hbar^2}{2m^{\perp}}\frac{(\mu_B g_{\text{Mn}})^2 z_0}{\left(\frac{1}{3}\beta J\right)^2 \gamma^2}. \tag{14}$$

Зная зависимость $\chi(T)$ (которая может быть измерена экспериментально для любой фазы), можно из (14) найти T_c.

4. В заключение остановимся на качественных различиях между двумерным FMP и рассмотренным в работах [1-3] трехмерным FMP. В том и другом случае существует критическая температура разрушения полярона. Однако наблюдаются принципиальные различия в поведении энергии связи FMP как функции температуры при $T \to T_c$ (рис. 2). В трехмерном случае наблюдается разрыв, в то время как в двумерном энергия связи обращается в 0 по корневому закону. Это вытекает из различного вида зависимости свободной энергии от радиуса локализации FMP в пространствах разной размерности.

Действительно, обменная часть свободной энергии при любой размерности пространства одинаковым образом зависит от параметра $a \sim (VT)^{-1}$, где V —

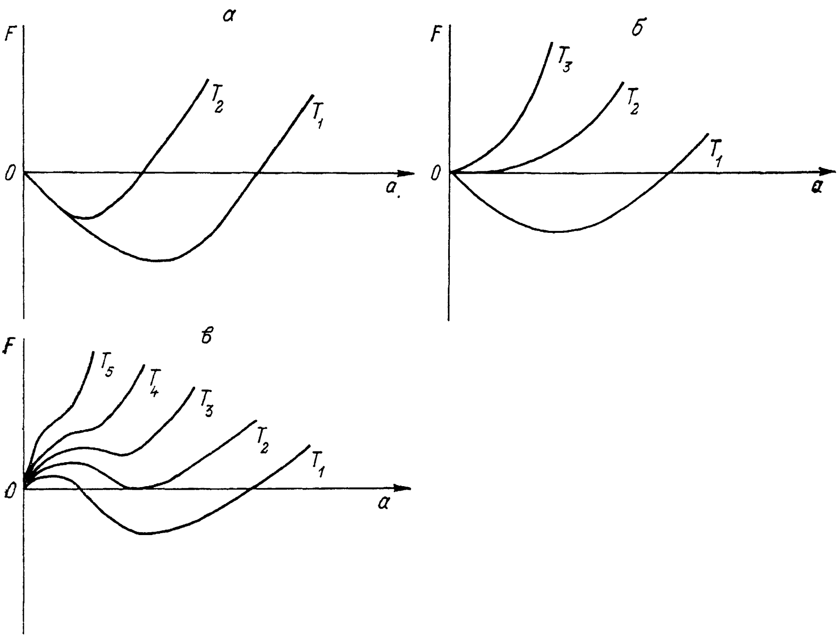

Рис. 5. Зависимость свободной энергии магнитного полярона F от параметра $a \sim (r_0^d T)^{-1}$ для одномерного (а), двумерного (б) и трехмерного (в) случаев.

а — $T_1 < T_2$, $T_c = \infty$; б — $T_1 < T_2 < T_3$, $T_2 = T_c$; в — $T_1 < T_2 < T_3 < T_4 < T_5$, $T_2 = T_c$, $T_4 = T_{c1}$.

характерный объем, занимаемый волновой функцией. $V \sim r_0^d$, где d — размерность пространства, r_0 — радиус локализации. Кинетическая энергия всегда пропорциональна r_0^{-2} и, следовательно, зависит от a как $(aT)^{2/d}$. На рис. 5 приведены зависимости полной свободной энергии, являющейся суммой кинетической и обменной частей, от a для одномерного (а), двумерного (б) и трехмерного (в) случаев. Видно, что в одномерном случае автолокализованное состояние существует при любой конечной температуре и является стабильным. Двумерный FMP имеет критическую температуру T_c, выше которой не существует локализованного состояния. В трехмерном случае при $T = T_c$ автолокализованное состояние не исчезает, но становится метастабильным (при этом $E \neq 0$) и существует вплоть до некоторой температуры T_{c1}.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность И. А. Меркулову, Ю. Г. Кусраеву и Е. Л. Ивченко за полезное обсуждение.

Список литературы

[1] Кривоглаз М. А., Трущенко А. А. // ФТТ. 1969. Т. 11. В. 11. С. 3119—3131.
[2] Кривоглаз М. А. // УФН. 1973. Т. 111. В. 4. С. 617—654.
[3] Берковская Ю. Ф., Гельмонт Б. Л., Цидильковский Э. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 855—862.

[4] Yakovlev D. R., Ossau W., Landwehr G., Bicknell-Tassius R. N., Waag A., Uraltsev I. N. // Sol. St. Commun. 1990. V. 76. N 3. P. 325—329.
[5] Ji-Wei Wu, Nurmikko A. V., Quinn J. J. // Sol. St. Commun. 1986. V. 57. N 11. P. 853—856.
[6] Ji-Wei Wu, Nurmikko A. V., Quinn J. J. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 2. P. 1080—1084.
[7] Gonsales da Silva C. E. T. // Phys. Rev. B 1986. V. 33. N 4. P. 2923—2925.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Санкт-Петербург

Получена 12.05.1991
Принята к печати 17.06.1991