

УДК 621.315.592

**ВЛИЯНИЕ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ДЫРКИ
С 3d-ЭЛЕКТРОНАМИ НА СВОЙСТВА
ГЛУБОКОГО АКЦЕПТОРА Mn В АРСЕНИДЕ ГАЛЛИЯ**

H. С. Аверкиев, А. А. Гуткин, Е. Б. Осипов, М. А. Рещиков

Предложена модель центра Mn_{Ga} в GaAs, основанная на рассмотрении обменного взаимодействия пяти 3d-электронов Mn со связанный на центре дыркой, исходное состояние которой имеет симметрию Γ_8 . В рамках этой модели вычислены магнитная восприимчивость нейтрального центра Mn_{Ga} и циркулярная поляризация связанный с Mn_{Ga} горячей фотолюминесценции в магнитном поле. Результаты расчетов с учетом небольшого расщепления состояний системы Mn_{Ga} +дырка в случайных электрических или деформационных полях хорошо объясняют данные экспериментов. При этом оказывается, что g -фактор связанный дырки составляет ~ -1 , константа обменного взаимодействия равна ~ -5 мэВ, а величина случайного расщепления основного уровня не превышает 1 мэВ.

Понимание структуры и свойств глубоких уровней, вводимых примесями и дефектами, является одной из актуальных задач физики полупроводников. Постоянный интерес к этой проблеме определяется не только прикладными задачами, обусловленными влиянием этих уровней на свойства материала. Существенную роль играет также и то обстоятельство, что характеристики глубоких центров тесным образом связаны как со свойствами идеального кристалла, так и с электронным строением самого примесного атома. Выявление и детализация этой связи являются решающими для построения теории глубоких центров [1, 2]. Одним из аспектов этой проблемы является роль обменного взаимодействия носителя, связанного на глубоком центре, с электронами незаполненных внутренних оболочек. В настоящей работе показано, что учет только этого взаимодействия для дырки, находящейся в исходном состоянии типа Γ_8 , позволяет объяснить существенное отличие оптических и магнитных свойств глубокого акцептора Mn в GaAs и обычного акцептора, в котором это взаимодействие отсутствует.

1. Модель акцепторного центра Mn_{Ga} в GaAs

Как известно, Mn, замещающий Ga в решетке GaAs, вводит в запрещенную зону акцепторный уровень, лежащий на ~ 0.11 эВ выше v -зоны. Рекомбинация электрона из v -зоны с дыркой на этом уровне дает полосу фотолюминесценции (ФЛ) с пиком при энергии фотонов ~ 1.41 эВ (при $T=(2-4)$ К).

Будем предполагать, что в нейтральном состоянии Mn_{Ga} имеет пять 3d-электронов и связывает одну дырку. Исходное состояние 3d-электронов характеризуется, как и в атоме Mn, нулевым полным орбитальным моментом и полным спином $S_d=5/2$, а исходное состояние дырки описывается волновыми функциями, преобразующимися по неприводимым представлениям Γ_8 , как и вершина валентной зоны, и, следовательно, имеет полный момент $J=3/2$. Пусть величины энергий, характеризующих все возмущения исходного состояния дырки, значительно меньше, чем энергетическое

расстояние до ближайшего возбужденного состояния дырки. Тогда в результате обменного взаимодействия, которое описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{\text{обм}} = -A (JS_d), \quad (1)$$

где A — константа обменного взаимодействия, исходные состояния $3d$ -электронов и дырки смешиваются и система характеризуется значениями полного момента $F = J + S_d$. $F = 1, 2, 3, 4$. Ниже будет показано, что экспериментальные данные объясняются, если основным состоянием является состояние с $F=1$ ($A < 0$). Энергии других состояний, отсчитываемые от основного, равны

$$E_{F=2} = -2A, \quad E_{F=3} = -5A, \quad E_{F=4} = -9A. \quad (2)$$

Волновые функции для каждого F классифицируются по проекциям полного момента m_F и могут быть составлены из исходных волновых функций с помощью коэффициентов Клебша—Гордана.

Эта модель хорошо описывает результаты пьезоспектроскопических исследований полосы фотолюминесценции MnGa [3–5], причем величина A , необходимая для количественного согласия расчетов и экспериментов, равна (-4 ± 1) мэВ [5]. В следующих разделах в рамках этой модели будут объяснены результаты исследований магнитной восприимчивости [6] и горячей фотолюминесценции [7], связанных с MnGa в GaAs Mn.

2. Магнитная восприимчивость нейтральных акцепторов MnGa.

Магнитная восприимчивость (χ) определяется выражением [8]

$$\chi = NkT \left[\frac{\partial^2 (\ln Q)}{\partial H^2} \right]_{H=0} = N \left[\frac{kT}{Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial H^2} \right]_{H=0}, \quad (3)$$

где T — температура, H — напряженность магнитного поля, N — концентрация центров MnGa, Q — статистическая сумма,

$$Q = \sum_n e^{-E_n/kT}. \quad (4)$$

Здесь n и E_n — номер и энергия состояния системы в магнитном поле. Из (3) следует, что для вычисления χ необходимо знать энергию уровней с различными значениями F и m_F вплоть до квадратичных по H членов.

Коэффициенты выражения $\epsilon_F = \alpha_F g_e - \beta_F g_h$, определяющего g -факторы состояний системы MnGa + дырка

F	α_F	β_F
1	$7/4$	$-3/4$
2	$11/12$	$1/12$
3	$17/24$	$7/24$
4	$5/8$	$3/8$

$$\mathcal{H}' = \mu_0 g_e (S_d H) - \mu_0 g_h (J H) = \mu_0 g_e (F H) - \mu_0 \times (g_e + g_h) (J H), \quad (5)$$

где μ_0 — магнетон Бора, g_e и g_h — g -факторы электронов в d -оболочке и дырки, связанной на центре MnGa. В предположении, что расщепление уровней вследствие обменного взаимодействия, описываемого гамильтонианом (1), много больше их расщепления во внешнем магнитном поле, энергия подуровней определяется значениями полного момента F и его проекции m_F .

$$E_n = E_{F, m_F} = E_F^0 + g_F m_F H + (g_e + g_h)^2 \mu_0^2 H^2 \delta_{F, m_F}, \quad \left. \begin{aligned} \delta_{F, m_F} = \sum_{F' \neq F} \frac{|\langle F, m_F | F_z | F', m_{F'} \rangle|^2}{E_F^0 - E_{F'}^0} & \quad m_F = m_{F'} \end{aligned} \right\} \quad (6)$$

Здесь g_F — g -фактор состояния системы с полным моментом F : $g_F = \alpha_F g_e - \beta_F g_h$, где α_F и β_F приведены в таблице. Используя (4) и (6), получим

$$\begin{aligned} x &= \frac{N}{kT} \frac{\mu_0^2}{Q_0} \left[2g_1^2 + 10g_2^2 \exp\left(\frac{2A}{kT}\right) + 28g_3^2 \exp\left(\frac{5A}{kT}\right) + 60g_4^2 \exp\left(\frac{9A}{kT}\right) \right] - \\ &- \frac{N}{8A} \frac{\mu_0^2}{Q_0} (g_e + g_h)^2 \left[21 - \frac{55}{27} \exp\left(\frac{2A}{kT}\right) - \frac{833}{108} \exp\left(\frac{5A}{kT}\right) - \frac{45}{4} \exp\left(\frac{9A}{kT}\right) \right], \end{aligned} \quad (7)$$

$$Q_0 = Q|_{H=0} = \sum_{F=1}^4 (2F+1) \exp(-E_F^0/kT). \quad (8)$$

При $kT \ll |A|$, $A < 0$ из (8) следует $x = \frac{2}{3} \frac{N\mu_0^2}{kT} g_1^2$, что соответствует магнитной восприимчивости системы частиц с полным моментом $F=1$ и g -фактором g_1 . В другом предельном случае $kT \gg |A|$ $x = \frac{N\mu_0^2}{3kT} \left(\frac{35}{4} g_e^2 + \frac{15}{4} g_h^2 \right)$, что отвечает независимому вкладу в восприимчивость электронов d -оболочки со спином $S_d = 5/2$ и дырки с $J = 3/2$.

На низкотемпературные свойства примесных центров в большой степени могут оказывать влияние внутренние электрические или деформационные поля. Действие этих полей существенно, когда вызываемые ими расщепления уровней порядка или больше kT . Для простоты будем считать, что случайное поле действует только на состояние дырки, величина поля для всех центров одинакова и расщепление уровней не зависит от направления поля. Такое возмущение описывается гамильтонианом

$$\mathcal{H}' = \frac{\delta}{2} \left(J_{z'}^2 - \frac{5}{4} \right), \quad (9)$$

где δ — константа, определяющая расщепление уровней, ось z' выбрана вдоль направления случайного поля. Вид гамильтониана (9) соответствует расщеплению уровня дырки с моментом $3/2$ на два подуровня, отвечающим проекциям момента $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$ на ось z' .

В рамках рассматриваемой модели при вычислении магнитной восприимчивости необходимо считать, что $|\mu_0 g_F H| \ll |\delta| \ll |A|$ и учитывать только основной уровень системы MnGa+дырка. Последнее является следствием условия $|\delta| \ll |A|$, в силу которого вклад в x уровней с $F=2, 3, 4$ имеет место только при $kT \gg |\delta|$, т. е. тогда, когда для каждого F подуровни, расщепившиеся из-за случайного поля, заселены одинаково. После усреднения (9) по состоянию с $F=1$ гамильтониан, описывающий влияние случайных полей и внешнего магнитного поля, примет вид

$$\mathcal{H}_{(1)}' = \mu_1 \left(m_1^2 - \frac{2}{3} \right) + \mu_0 g_1 [F_{z'} \cos \Theta + F_{x'} \sin \Theta] H, \quad (10)$$

где m_1 равно 0, ± 1 , Θ — угол между направлениями магнитного поля и случайного поля. Первый член (10) описывает расщепление основного уровня на два подуровня, величина расщепления $\delta_1 = 3/20\delta$. Учет различных ориентаций случайного электрического поля сводится к интегрированию по углу Θ выражения (3). Такие вычисления дают

$$x = 2N \frac{(\mu_0 g_1)^2}{3kT} \frac{\left(1 - \frac{2kT}{\delta_1} \right) \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right) + \frac{2kT}{\delta_1} \exp\left(\frac{2\delta_1}{3kT}\right)}{2 \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right) + \exp\left(\frac{2\delta_1}{3kT}\right)}. \quad (11)$$

При $kT \gg |\delta_1|$ (11) совпадает с (7), если в (7) $kT \ll |A|$, т. е. все центры находятся в основном состоянии с $F=1$.

Сопоставим экспериментальные зависимости $x(T)$ (рис. 1), полученные в [6], с формулой (7). Процедура выбора параметров теории состоит в следующем. По низкотемпературной части кривой $x(T)$, для которой члены, содержащие экспоненты, пренебрежимо малы, определяется пара-

метр g_1 . Это позволяет, считая что $g_\epsilon = 2$, а $g_1 = \alpha_1 g_\epsilon - \beta_1 g_h$, вычислить g_h . После этого, пользуясь таблицей, можно получить g_2 , g_3 и g_4 и, подбирая

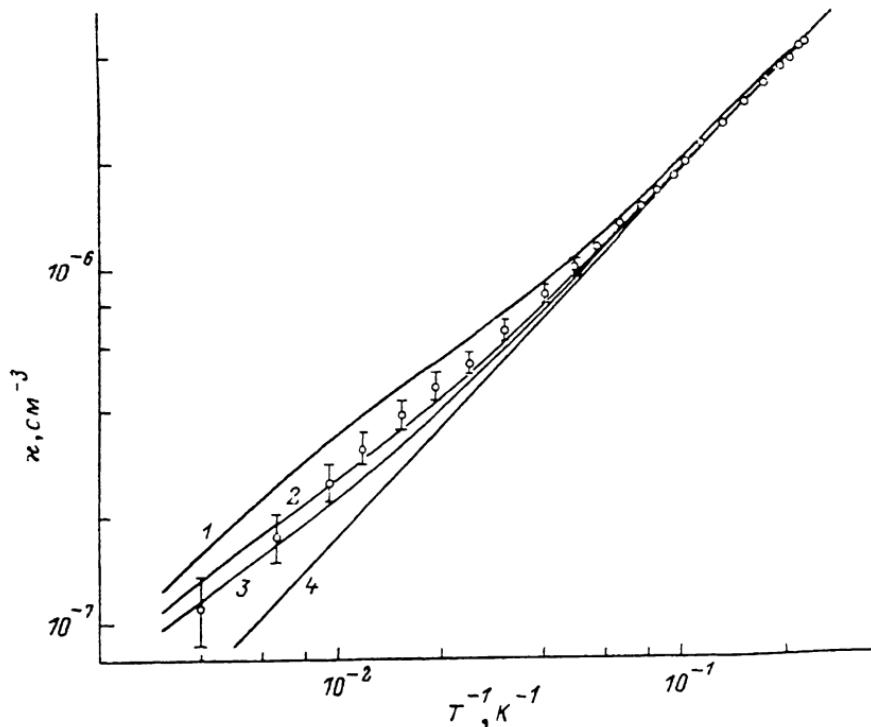


Рис. 1. Температурная зависимость объемной магнитной восприимчивости, связанной с примесью Mn в GaAs. Образец с концентрацией центров Mn₂Ga $5.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$.

Точки — эксперимент [6]. Сплошные линии — расчет по формулам (7) и (8) при различных A . A , мэВ: 1 — -2 , 2 — -5 , 3 — -8 , 4 — $-\infty$.

A , описать зависимость $\chi(T)$ во всем исследованном интервале температур (рис. 1). Такая аппроксимация дает $g_1 \approx 2.75$, $g_h \approx -1$, $A = -(5 \pm 1)$ мэВ. Полученная величина g_h представляется разумной [9], а величина A прак-

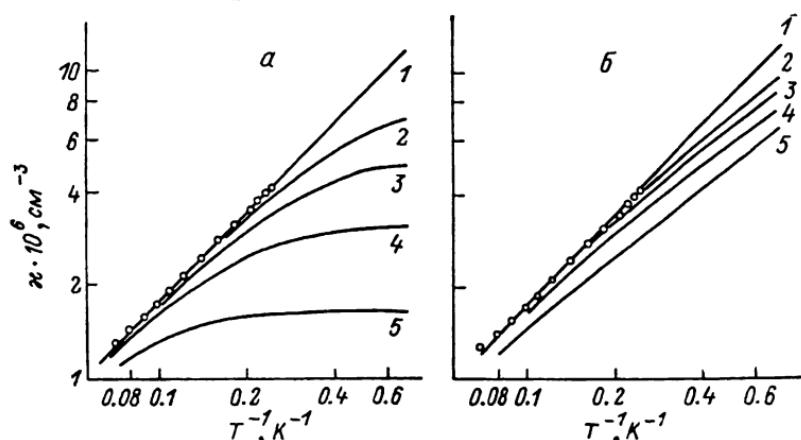


Рис. 2. Сопоставление низкотемпературной части зависимости $\chi(T)$ с расчетами, учитывающими влияние случайных полей.

Точки — эксперимент для образца с концентрацией центров $5.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ [6]. Сплошные линии — расчет по формуле (11) при $g_1 = 2.75$ и различных значениях δ_1 . α — $\delta_1 > 0$, β — $\delta_1 < 0$. $|\delta_1|$, мэВ:

1 — 0, 2 — 0.4, 3 — 0.6, 4 — 1.0, 5 — 2.0.

тически совпадает с определенной из пьезоспектроскопических измерений [5].

Хорошее согласие выражения (7) с экспериментом свидетельствует о пренебрежимом влиянии случайных полей в исследованном интервале

температура ($T > 4.2$ К). Для оценки максимально возможной при этом величины δ_1 мы вычислили x , используя (11) при $g_1=2.75$ и разных δ_1 . Рис. 2, на котором результаты расчетов сопоставлены с низкотемпературной частью экспериментальной зависимости $x(T)$, показывает, что в исследуемых образцах $|\delta_1| \leq 0.5$ мэВ.

Заметим, что влияние случайных полей описано нами в модельной ситуации, которая предполагает, что поля сферически симметричны. Отступление от сферической симметрии к кубической в общем случае может приводить к расщеплению уровня с $F=1$ не на 2, а на 3 невырожденных подуровня. Однако поскольку независимо от того, вырожденный или невырожденный подуровень является основным (т. е. независимо от знака δ_1), влияние случайных полей на x становится заметным при близких температурах (рис. 2), замена кубической симметрии на сферическую не существенна для оценок.

3. Циркулярная поляризация фотолюминесценции, вызванной рекомбинацией горячих электронов с дыркой на центре MnGa в магнитном поле

Степень циркулярной поляризации ФЛ определяется выражением

$$P_c = \frac{I_+ - I_-}{I_+ + I_-}, \quad (12)$$

где I_+ и I_- — интенсивности ФЛ, поляризованной по правому и левому кругу (имеющей σ^+ и σ^- поляризацию). Поскольку измерения P_c ^[7] проводились при $T=2$ К, можно считать, что система дырка +MnGa находится в основном состоянии $F=1$.

Пренебрежем вначале существованием случайных полей. В магнитном поле состояние с $F=1$ расщепляется на 3 подуровня с $m_F=0, \pm 1$, которым соответствуют волновые функции $|F, m_F\rangle$

$$\left. \begin{aligned} |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J - \Psi_{-s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J + \sqrt{\frac{3}{2}} (\Psi_{-s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J - \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J) \right\} \\ |1, -1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{20}} \left\{ \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J - \sqrt{3} \Psi_{-s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J + \sqrt{6} \Psi_{-s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J - \sqrt{10} \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J \right\}, \\ |1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{20}} \left\{ \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J - \sqrt{6} \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{-s_{1/2}}^J + \sqrt{3} \Psi_{s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J - \Psi_{-s_{1/2}}^S \Psi_{s_{1/2}}^J \right\}, \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

где $\Psi_{m_S}^S$ и $\Psi_{m_J}^J$ — соответственно волновые функции d -электронов с проекцией суммарного момента m_S и дырки с проекцией момента m_J . Рассмотрим вначале рекомбинацию электронов со дна зоны проводимости с дырками на центре MnGa, находящемся в состояниях, описываемых (13), в предположении, что внешнее магнитное поле не ориентирует электроны. Тогда выражение для степени циркулярной поляризации холодной фотoluminesценции P_c^0 имеет вид

$$P_c^0 = \frac{5}{7} \frac{\operatorname{sh} x}{\frac{3}{7} + \operatorname{ch} x}, \quad x = \frac{\mu_0 g_1 H}{kT} \quad (14)$$

и предельная величина P_c^0 при $x \rightarrow \infty$ ($P_c^0(\infty)$) составляет $5/7$. В тех же предположениях для мелкого акцептора $P_c^0(\infty) = -1$. Разница между этими двумя случаями обусловлена смешиванием волновых функций дырки и их антиферромагнитным выстраиванием ($F=1$) за счет обмена, существующего в центре MnGa. Можно ожидать, что эти особенности поляризации сохранятся и в условиях горячей люминесценции с участием MnGa. Однако при этом P_c начинает зависеть от энергии электронов и анизотропии их распре-

деления [10], и для ее вычисления необходимо знание явного вида волновых функций дырки $\Psi_{m,l}^j$ на центре Mn_{Ga}. Приближенные оценки ρ_c могут быть сделаны так же, как и в работах [7, 11], в сферическом двухзонном приближении. Это означает, что угловые зависимости $\Psi_{m,l}^j$ и волновой функции дырки, связанной на мелком акцепторе или на глубоком центре с потенциалом нулевого радиуса, аналогичны. В условиях эксперимента [7] кинетическая энергия рекомбинирующего электрона значительно больше энергии связи дырки, и ρ_c зависит только от анизотропии распределения электронов по импульсам, описываемой параметром α [7, 11, 12]. По-преж-

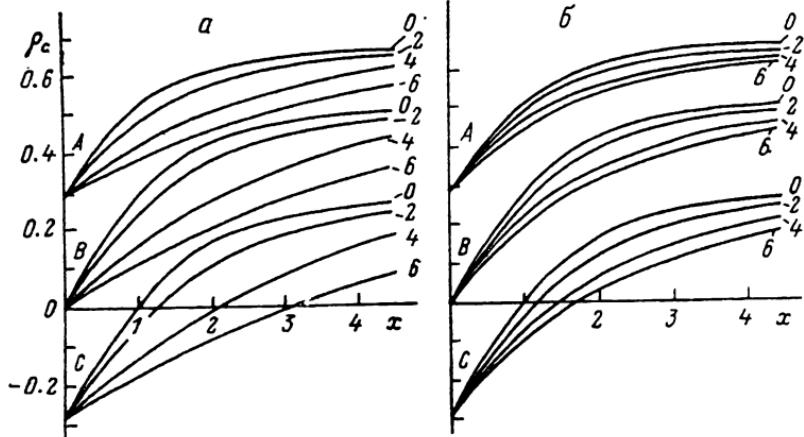


Рис. 3. Влияние случайных полей на зависимость степени циркулярной поляризации горячей ФЛ Mn_{Ga} в GaAs от магнитного поля (расчет по формулам Приложения).

a — $\delta_1 > 0$, *b* — $\delta_1 < 0$. *A* и *C* — σ^+ - и σ^- -возбуждение ($2s + \beta = \mp 0.6$, $\beta = \mp 0.4$); *B* — π -возбуждение ($2s + \beta = 0$, $\beta = 0$). Цифры около кривых означают величину δ_1/kT ; $x = \log_2 H/kT$, $\alpha = -1$.

нему предполагая, что рекомбинирующие горячие электроны не ориентируются в магнитном поле, можно записать следующее выражение для ρ_c

$$\rho_c = \frac{63(5-\alpha)}{707-43\alpha} \frac{2 \operatorname{sh} x}{2 \operatorname{ch} x + \frac{686-19\alpha}{707-43\alpha}}. \quad (15)$$

В слабых полях ($x \ll 1$) зависимость ρ_c от H определяется выражением

$$\rho_c = \frac{6}{5} \frac{5-\alpha}{20-\alpha} x. \quad (15a)$$

При оптической ориентации электронов, характеризуемой их средним спином s и коэффициентом корреляции между спином и импульсом электронов β [10, 12], формула для ρ_c имеет вид

$$\rho_c = \frac{126(5-\alpha) \operatorname{sh} x - 322(2s+\beta) - 728(2s+\beta) \operatorname{ch} x}{2(707-43\alpha) \operatorname{ch} x + 686-19\alpha - 504(2s+\beta) \operatorname{sh} x}. \quad (16)$$

Рассмотрим в рамках настоящей модели влияние случайных полей, при которых расщепление уровней $|\delta|$ значительно меньше $|A|$. Поскольку в экспериментах [7] $kT \ll |A|$, будем учитывать только основной уровень $F=1$. Как и при вычислении магнитной восприимчивости, ограничимся сферическим приближением. Волновые функции и спектр состояний системы Mn_{Ga}+дырка в ситуации, когда магнитное расщепление и расщепление из-за случайных полей могут быть сравнимы по величине, получаются из гамильтониана (10). Последний для удобства вычислений надо записать в системе координат, связанной с направлением магнитного поля

$$\mathcal{H}_{(1)}'' = \mu_0 g_F F_z H + \delta_1 \left(F_z^2, -\frac{2}{3} \right). \quad (17)$$

Здесь магнитное поле параллельно оси z , а случайное — оси z' . Характеристическое уравнение матрицы (17) имеет вид

$$\lambda^3 - \lambda(12 + y^2) + 2[(8 + y^2) - 3y^2 \cos \Theta] = 0, \quad (18)$$

где $\lambda = 6\varepsilon/\delta_1$ (ε — энергия подуровня, соответствующая гамильтониану (17)), $y = 6\mu_0 g_1 H/\delta_1$, Θ — угол между z и z' . Волновые функции, отвечающие i -му подуровню расщепившегося основного состояния, являются суперпозицией волновых функций (13) с коэффициентами $C_{1,0}^i$, $C_{1,1}^i$ и $C_{1,-1}^i$, зависящими от y и Θ . Рассматривая, как и выше, излучательный захват горячих электронов системой Mn_{Ga} + дырка в состояниях, описываемых этими волновыми функциями, можно получить выражения для вычисле-

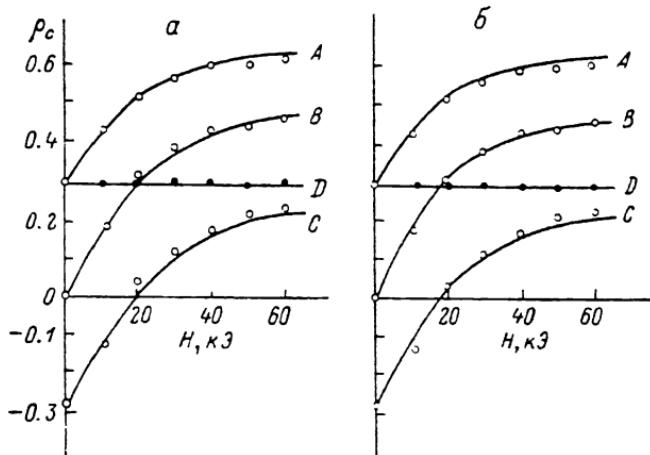


Рис. 4. Сопоставление экспериментальных зависимостей $\rho_c(H)$ и $\chi(H)$ с расчетом, учитывающим случайные поля (формулы Приложения) при $g_b = -1$ ($g_1 = 2.75$). $a = -1$. Точки — эксперимент [7]. Сплошные линии — расчет. a — $\delta_1 = 0.6$ мэВ. b — $\delta_1 = -0.9$ мэВ. A и C — $\rho_c(H)$ при $2s+\beta=\pm 0.6$, $\beta=\pm 0.4$. B — $\rho_c(H)$ при $2s+\beta=0$, $\beta=0$. D — $\chi(H)$ при тех же значениях параметров, что и A и C .

ния ρ_c , которые приведены в Приложении. Результаты численных расчетов ρ_c при $\alpha = -1$, $2s + \beta = \mp 0.6$ для σ^+ и σ^- возбуждения соответственно и $2s + \beta = 0$ для π -возбуждения приведены на рис. 3. Видно, что случайное поле уменьшает ρ_c при любом возбуждении. В условиях, когда $\mu_0 g_1 H \ll |\delta_1|$, kT , из формул раздела 1 Приложения можно получить, что для π -возбуждения

$$\rho_c = \frac{2}{5} \frac{5 - \alpha}{20 - \alpha} \frac{3 \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right)}{\exp\left(\frac{2\delta_1}{3kT}\right) + 2 \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right)} x. \quad (19)$$

Сравнение формул (19) и (15a) показывает, что в слабых магнитных полях влияние случайных расщеплений сводится к увеличению эффективной температуры,¹ учет которого при аппроксимации экспериментальных данных должен дать увеличение g_1 по сравнению с величиной, получающейся при использовании (15).

Сопоставим результаты экспериментальных исследований [7] с расчетами ρ_c в предложенной модели. Прежде всего отметим, что, поскольку $\alpha \ll 1$ [10], ρ_c , согласно (15), положительно, что согласуется с экспериментом [7]. Так же как и для ρ_o^0 , это обусловлено выбором знака A . В на-

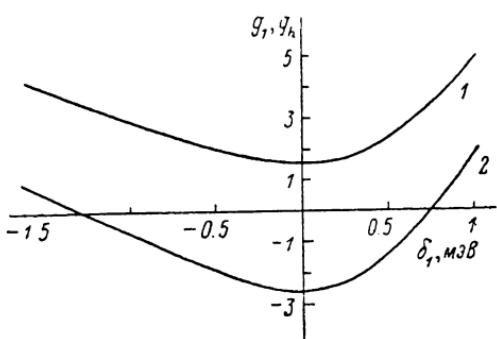
¹ При $\delta_1 \rightarrow 0$ (19) не переходит в (15a), поскольку (19) получено в предположении, что $|\delta_1| \gg \mu_0 g_1 H$. В связи с этим предельный переход при $\delta_1 \rightarrow 0$ соответствует случаю $\mu_0 g_1 H \ll |\delta_1| \ll kT$, который требует усреднения по всем направлениям случайных полей. Это усреднение и дает отличие предельного значения (19) от (15a) в три раза.

шей модели $A < 0$, что эквивалентно антиферромагнитному обменному взаимодействию между $3d$ -электронами и дыркой на Mn ($F=1$ для основного состояния). Для численных сопоставлений расчета с экспериментом учтем, что $\alpha = -1$ [7, 12]. Тогда, как показывают расчеты, аппроксимация экспериментальных данных достигается как при $\delta_1 = 0$ (выражения (15) и (16)), так и при $\delta_1 \neq 0$ (формулы раздела 1 Приложения) (см., например, рис. 4). При этом $2s + \beta$ и β в случаях σ^+ - и σ^- -возбуждений, независимо от задаваемых значений δ_1 , оказались равными ± 0.6 и ± 0.4 соответственно. Значение δ_1 влияло только на g_1 и, следовательно, на величину g_h при постоянном g_s . На рис. 5 показаны зависимости g_1 и g_h , обеспечивающих наилучшее согласие расчетных кривых $\rho_c(H)$ с экспериментом, от величины δ_1 , задаваемой при расчете. Видно, что g_1 и g_h близки к полученным из экспериментов по магнитной восприимчивости, если $\delta_1 \approx -0.9$ мэВ или $\delta_1 \approx 0.6$ мэВ. Такие значения δ_1 не противоречат оценкам, сделанным в разделе 2.

В [7], кроме $\rho_c(H)$, была экспериментально определена величина χ , равная

Рис. 5. Зависимость величин g -факторов g_1 и g_h , обеспечивающих согласие расчетов с экспериментом [7] от величины случайного расщепления δ_1 .

1 — g_1 , 2 — g_h .



$$\chi = \frac{\rho_{\sigma+} - \rho_{\sigma-}}{2} - \eta \frac{\rho_{\sigma+} + \rho_{\sigma-}}{2}. \quad (20)$$

Здесь $\rho_{\sigma+}$ и $\rho_{\sigma-}$ представляют собой ρ_c при σ^+ - и σ^- -возбуждении, а η — параметр спин-зависящей рекомбинации

$$\eta = \frac{I_{\sigma+} - I_{\sigma-}}{I_{\sigma+} + I_{\sigma-}}, \quad (21)$$

где $I_{\sigma+}$ и $I_{\sigma-}$ — полные интенсивности ФЛ при σ^+ - и σ^- -возбуждении. Оказалось, что χ практически не зависит от H (рис. 4). В рамках нашей модели для $\delta_1 = 0$

$$\chi = -(2s + \beta) \frac{322 + 728 \operatorname{ch} x}{686 - 19\alpha + 2(707 - 43\alpha) \operatorname{ch} x} \quad (22)$$

и увеличивается менее чем на 2 % с увеличением x от 0 до ∞ . Для $\delta_1 \neq 0$ диапазон изменения χ , согласно расчетам, еще меньше. Хорошее согласие расчетного χ с экспериментальным также достигается при $2s + \beta = \mp 0.6$ (рис. 4).

4. Обсуждение результатов

Результаты, приведенные в предыдущих разделах, позволяют заключить, что модель, учитывающая обменное взаимодействие, способна объяснить не только поведение ФЛ MnGa при одноосном давлении [5], но и все другие известные свойства центра MnGa в GaAs, а именно, особенности циркулярной поляризации горячей ФЛ MnGa в магнитном поле и температурную зависимость магнитной восприимчивости. Привлекательная черта рассмотренной модели состоит в том, что все отличия указанных выше свойств MnGa от аналогичных свойств нейтрального мелкого акцептора объясняются только существованием обменного расщепления состояний. Константа обменного взаимодействия A составляет примерно -5 мэВ. При этом константы деформационного потенциала [5] и g -фактор дырки близки по величине к соответствующим параметрам дырки на мелком ак-

цепторе. Отметим, что все результаты исследований пьезоспектроскопического эффекта [5] и магнитной восприимчивости [6] объясняются и при $\delta_1=0$. Это обусловлено тем, что в указанных экспериментах величина внешнего воздействия (деформации или температуры) на систему $Mn_{Ga} +$ дырка превосходила характерную величину случайного расщепления уровней δ_1 . Учет небольшой величины δ_1 необходим лишь для количественного описания (при $g_1 \approx -1$) циркулярной поляризации горячей ФЛ в магнитном поле [7], поскольку внешнее воздействие ($\mu_0 g_1 H$) в этих экспериментах оказывается сравнимым с δ_1 . В рамках рассматриваемой нами модели ситуация $|\delta_1| \gg \mu_0 g_1 H$ противоречит результатам эксперимента (см. раздел 2 Приложения). Оцененная нами величина δ_1 (~ 0.5 мэВ) представляется разумной и значительно меньше константы обменного взаимодействия. Уменьшение значения случайного расщепления по сравнению с указанным (например, в более совершенных кристаллах GaAs Mn) согласно рассматриваемой модели должно позволить наблюдать сигнал ЭПР от системы $Mn_{Ga} +$ дырка с g -фактором ~ 2.75 .

В заключение отметим, что экспериментальные результаты [6, 7] ранее объяснялись в других моделях.

Обменное взаимодействие дырки с 3d-электронами Mn в GaAs впервые было учтено в [7], однако в этой работе предполагалось, что расщепление в случайных полях намного превышает обменное расщепление. Сопоставление расчетов магнитной восприимчивости, проведенной нами в рамках этой модели, с данными [6] приводит либо к мнимой величине g_A (при $|A| \ll 0.5$ мэВ), либо к значительным отличиям найденных g_A и g_1 от величин, определенных из циркулярной поляризации [7]. В последнем случае, кроме того, величина случайного расщепления примесного уровня оказывается более 20 мэВ, что в полупроводниках типа GaAs с концентрацией примеси ниже 10^{19} см⁻³ не наблюдалось и представляется маловероятным.

В [6] температурная зависимость магнитной восприимчивости интерпретировалась в модели, предполагающей, что дырка находится в 3d-оболочке Mn, состояния которого сильно расщеплены в силу эффекта Яна—Теллера. Однако такая модель противоречит существованию интенсивной полосы ФЛ, связанной с захватом электрона со дна c -зоны на Mn_{Ga} . Кроме того, значительное ян-теллеровское искажение центра Mn_{Ga} не подтверждается пьезоспектроскопическими экспериментами [3–5].

ПРИЛОЖЕНИЕ

1. Величина ρ_c в модели, предполагающей, что расщепление уровня c $F=1$ в случайных полях δ_1 по абсолютной величине меньше константы обменного взаимодействия $|A|$, при низких температурах ($kT \ll |A|$) определяется соотношением (12), в котором

$$I_+ - I_- = 51(a_1 - a_2) - \frac{98}{3}(a_1 + a_2) + 14(a_3 + a_4)(2s + \beta) + 15(a_3 - a_4),$$

$$I_+ + I_- = 59(a_1 + a_2) + 39(a_3 + a_4) - 6(a_1 - a_2)(14s + 5\beta) + 2(a_3 - a_4)(14s - 11\beta).$$

Здесь

$$a_k = \sum_{i=0}^2 2 \int_0^1 B_k^i \frac{\exp(-\lambda_i \frac{\delta_1}{6kT})}{\sum_{j=0}^2 \exp(-\lambda_j \frac{\delta_1}{6kT})} dt,$$

где $t = \cos \Theta$, λ_i — корни уравнения (18),

$$\lambda_i = 2 \sqrt{\frac{12 + y^2}{3}} \cos \frac{(\varphi + 2\pi i)}{3}, \quad \varphi = \arccos \left[-\frac{8 + y^2 - 3y^2 t^2}{\left(\frac{12 + y^2}{3} \right)^{3/2}} \right]$$

$$B_1^z = 9(C_{1,-1}^z)^2 + 3(C_{1,0}^z)^2 + 1,$$

$$B_2^z = 9(C_{1,1}^z)^2 + 3(C_{1,0}^z)^2 + 1,$$

$$B_3^z = 6 - 3(C_{1,1}^z)^2,$$

$$B_4^z = 6 - 3(C_{1,-1}^z)^2,$$

$$C_{1,\pm 1}^z = \frac{[2(3t^2 - 1) + i_z] [y \pm (i_z - 2)]}{6\sqrt{2}(i_z - 2)t\sqrt{1-t^2}} C_{1,0}^z,$$

$$(C_{1,0}^z)^2 + (C_{1,-1}^z)^2 + (C_{1,1}^z)^2 = 1.$$

2. В предельном случае $|\delta_1| \gg \mu_0 g_1 H$, kT эти выражения значительно упрощаются. В частности, при π -возбуждении ($s = 0$, $\beta = 0$)

$$\rho_c = \frac{9}{5} \frac{5-\alpha}{20-\alpha} \int_0^1 y \operatorname{th}(yx) dy \quad \text{при } \delta_1 < 0,$$

$$\rho_c = 0 \quad \text{при } \delta_1 > 0.$$

Таким образом, максимальное значение ρ_c в этом случае при $\alpha = -1$ не может превышать $9/35$, что примерно в 2 раза меньше, чем наблюдалось экспериментально [7]. Это показывает, что ситуация $|\delta_1| \gg \mu_0 g_1 H$ не реализуется при максимальных магнитных полях, достигаемых в эксперименте [7].

Авторы благодарят И. А. Меркулова и В. Ф. Мастерова за плодотворное и стимулирующее обсуждение результатов.

Л и т е р а т у р а

- [1] Мастеров В. Ф. ФТП, 1984, т. 18, № 1, с. 3—23.
- [2] Zunger A. Sol. St. Phys. ed. H. Ehrenreich and D. Turnbull, N. Y.: Ac. Press, 1986, vol. 36, p. 275—464.
- [3] Schairer W., Schmidt M. Phys. Rev., 1974, vol. B10, N 6, p. 2501—2506.
- [4] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Колчанова Н. М., Рещиков М. А. ФТП, 1984, т. 18, № 9, с. 1629—1633.
- [5] Аверкиев Н. С., Гуткин А. А., Осипов Е. Б., Рещиков М. А. ФТП, 1987, т. 21, № 10, с. 1847—1853.
- [6] Андрианов Д. Г., Больцева Ю. Н., Лазарева Г. В., Савельев А. С., Якубеня С. М. ФТП, 1983, т. 17, № 5, с. 810—813.
- [7] Карлик И. Н., Меркулов И. А., Мирлин Д. Н., Никитин Л. Н., Перель В. И. Сапега В. Ф. ФТП, 1982, т. 24, № 12, с. 3550—3557.
- [8] Ландau Л. Д., Либшиц Е. М. Статистическая физика. М.: Наука, 1964. 567 с.
- [9] Джоев В. Д., Захарченя Б. П., Флейшер В. Г. Письма в ЖЭТФ, 1973, т. 17, № 5, с. 244—247.
- [10] Дымников В. Д., Дьяконов М. И., Перель В. И. ЖЭТФ, 1976, т. 71, № 6 (12), с. 2373—2380.
- [11] Поляков Д. Г. ФТП, 1982, т. 24, № 12, с. 3542—3549.
- [12] Захарченя Б. П., Мирлин Д. Н., Перель В. И., Решина И. И. УФН, 1982, т. 136, № 3, с. 458—499.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН ССР
Ленинград

Поступило в Редакцию
22 сентября 1987 г.