1988 ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА Том 30, в. 7
1988 SOLID STATE PHYSICS Vol. 30, № 7

УДК 621.315.592

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ СВОЙСТВ МАГНИТНОГО ПОЛЯРОНА, СВЯЗАННОГО НА АКЦЕПТОРЕ

Б. Л. Гельмонт, И. А. Меркулов, Ю. Ф. Рузина, И. Л. Бейнихес

Исследованы температурные зависимости средней энергии, свободной энергии и полного магнитного момента магнитного полярона, образованного дыркой, связанной на акцепторе у края сложной валентной зоны (спин дырки $\mathcal{J}=3/2$) в полумагнитном полупроводнике с кубической симметрией. Учтены принципиальные отличия от случая частицы со спином $\mathcal{J}=1/2$. Изучена зависимость магнитополяронного эффекта от отношения масс в валентной зоне $\gamma=m_l/m_h$ и от вида потенциала притягивающего центра (рассмотрены случаи кулоновского центра и центра с потенциалом «нулевого радиуса»). Показано, что поскольку оба фактора сильно влияют на ход температурной зависимости энергии акцептора, то для интерпретации результатов эксперимента в $Cd_{1-x}Mn_xTe$ ($\gamma \ll 1$) нужно учитывать, что изучаемый акцепторный центр — глубокий.

Как хорошо известно, в магнитных и полумагнитных полупроводниках обменное взаимодействие между носителями заряда и f- или d-электронами магнитных ионов может привести к образованию магнитных поляронов [1-4]. Для носителей заряда со спином $\mathcal{J}=1/2$ температурная зависимость состояния магнитного полярона, связанного на примесном центре, исследовалась в ряде теоретических работ [2-4]. Однако в [5] нами было показано, что структура основного состояния такого полярона существенно зависит от величины спина носителя. Хотя и при $\mathcal{J}=1/2$ и при $\mathcal{J}=3/2$ наиболее глубокое магнитополяронное состояние имеет цилиндрическую симметрию, а проекция (M) полного момента носителя (**F**) на ось симметрии максимальна ($M=1/2$ для $\mathcal{J}=1/2$ и $M=3/2$ для $\mathcal{J}=3/2$), пространственное распределение среднего значения спина носителя $\langle \boldsymbol{\mathcal{J}} \rangle$ и поляризации магнитных ионов $\langle \mathbf{I}_n \rangle$ для $\mathcal{J}=1/2$ и $\mathcal{J}=3/2$ существенно различны.

Ниже приводятся результаты исследования температурных зависимостей свободной энергии, энергии и магнитного момента связанного магнитного полярона для носителей с $\mathcal{J}=3/2$. В исследовавшихся соединениях ($Cd_{1-x}Mn_xTe$, $Hg_{1-x}Mn_xTe$) такой спин имеют дырки в валентной зоне. Поэтому при $\mathcal{J}=3/2$ мы будем говорить о поляроне, локализованном на акцепторе, сравнивая его с поляроном, локализованном на доноре (спин электронов проводимости равен 1/2).

Для $\mathcal{J}=1/2$ орбитальное движение носителя в основном состоянии описывается волновой функцией s-типа. При этом $\mathbf{F}=\boldsymbol{\mathcal{J}}$ и во всех точках полярона $\langle \boldsymbol{\mathcal{J}} \rangle$ и спины магнитных ионов ($\langle \mathbf{I} \rangle$) направлены вдоль оси симметрии.

Если же $\mathcal{J}=3/2$, то спин носителя сильно взаимодействует с его орбитальным движением. Для свободной квазичастицы это приводит к расщеплению дисперсионной кривой на две подзоны легких и тяжелых дырок массы m_l и m_h соответственно [6]. Для дырки, локализованной на акцепторном центре, это взаимодействие проявляется в существенной перестройке волновой функции основного состояния, которая теперь содержит как s- так и d-волны [7]. По отдельности ни $\boldsymbol{\mathcal{J}}$, ни орбитальный момент L не сохраняются, и лишь полный угловой момент $\mathbf{F}=\mathcal{J}+\mathbf{L}$ остается «хорошим» квантовым числом. При этом $\langle\mathcal{J}\rangle$ и $\langle\mathbf{I}\rangle$ изменяются от точки к точке [5, 8, 9]. Уменьшение величины $\langle\mathcal{J}\rangle$ ($|\langle\mathcal{J}\rangle|<3/2$) приводит к эффективному ослаблению обменного взаимодействия между локализованной дыркой и магнитными электронами магнитных ионов.

Величину спин-орбитального взаимодействия удобно характеризовать отношением масс легкой и тяжелой дырок $\gamma=m_l/m_h$. При $\gamma=1$ $\mathcal{J}$ и L не взаимодействуют. В основном состоянии $\mathbf{L}=0$ и акцепторный центр аналогичен донорному. Максимальные различия следует ожидать при $\gamma\ll 1$, когда $m_l\ll m_h$ и примесь d-функции в основном состоянии максимальна.

Ниже будет показано, что при уменьшении γ от единицы до нуля обменное взаимодействие локализованной дырки с магнитными ионами ослабевает примерно в два раза. При этом оказывается, что основной вклад в магнитополяронную энергию (80—90 %) дает s-компонента волновой функции.[1] Как и в [5], расчеты выполнены в приближении среднего поля для двух моделей примесного центра — кулоновского и описываемого потенциалом «нулевого радиуса». Показано, что при прочих равных условиях магнитополяронная энергия кулоновского центра имеет более сильную температурную зависимость, что связано с ее меньшей локализацией.

Результаты расчета применяются для интерпретации экспериментальных данных работы [11] для акцептора в p-$\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$.

1. Расчет температурной зависимости энергии, свободной энергии и полного момента полярона

Оператор обменного взаимодействия дырки с магнитными ионами решетки имеет вид

$$V_{ex}=\frac{\beta}{3}\sum_n \hat{\rho}(\mathbf{r}_n)(\mathcal{J}\mathbf{I}_n). \tag{1}$$

Здесь $\mathbf{I}_n$ и $\mathbf{r}_n$ — оператор спина и радиус-вектор магнитного иона с номером n; $\hat{\rho}(\mathbf{r}_n)=\hat{\delta}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_n)$ — оператор плотности магнитных ионов; β — константа обменного взаимодействия дырки. Локальное обменное поле на ионе с номером n, порождаемое спином дырки

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}_n)=\frac{\beta I}{3g_M\mu_B}\langle\psi^*_{3/2}(\mathbf{r}_n)|\mathcal{J}|\psi_{3/2}(\mathbf{r}_n)\rangle, \tag{2}$$

где g_M — g-фактор магнитного иона, μ_B — магнетон Бора, $\psi_{3/2}(\mathbf{r})$ — волновая функция основного состояния дырки в поляроне, у которого проекция полного углового момента на ось квантования $M=3/2$ [5]

$$\psi_{3/2}(r)=2\sum_{lm\sigma}(-1)^l\begin{pmatrix} l & 3/2 & 3/2\\ m & \sigma & -3/2\end{pmatrix}R_l(r)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,\chi_\sigma. \tag{3}$$

Здесь $\begin{pmatrix} l & \mathcal{J} & F\\ m & \sigma & -M\end{pmatrix}$ — $3j$-символы Вигнера; m, σ, M — проекции на ось квантования орбитального, спинового и полного угловых моментов; $R_l(r)$ — радиальные части волновой функции; $Y_{lm}(\theta,\varphi)$ — шаровые функции; χ_σ — собственные векторы матрицы $\mathcal{J}_z$. Из правила сложения моментов следует, что функция (3) включает радиальные компоненты $R_0(r)$ и $R_2(r)$ соответственно s- и d-симметрии, а также все возможные спиноры χ_σ.

Подставляя (3) в (2), находим выражение для величины поля и его проекции на ось симметрии полярона Z

$$H(r)=\frac{\beta I}{8\pi g_M\mu_B}R_0^2\xi,\quad H_Z(r)=\frac{\beta I}{8\pi g_M\mu_B}R_0^2\xi_Z, \tag{4}$$

---

[1] Этот вывод справедлив и для магнитного полярона, образованного свободной дыркой, который был рассмотрен в [10].

где ξ и ξ_Z зависят от отношения радиальных функций $R_2/R_0=\eta$ и угла θ радиус-вектора r с осью Z $(t=\cos\theta)$

$$\xi(\eta, t)=[(1+2\eta+\eta^2)-(t^2\eta)(6+2\eta+4\eta^2-\eta^3)+(t^2\eta)^2(7+2\eta+\eta^2)-\\-(t^2\eta)^3(2+\eta)]^{1/2}, \tag{5}$$

$$\xi_Z(\eta, t)=1+\eta-3(t^2\eta)+(t^2\eta)^2. \tag{6}$$

Свободная энергия Φ, энергия E и полный магнитный момент M полярона даются формулами

$$\Phi=U+K+\sum_n f_n,$$

$$E=U+K+\sum_n \varepsilon_n,$$

$$M=\mu_h+\sum_n \mu_n, \tag{7}$$

где μ_h, U, K — средние значения магнитного момента, потенциальной и кинетической энергии, локализованной дырки; μ_n, f_n, ε_n — средние магнитный момент, свободная энергия и энергия n-го магнитного иона в поле H. Как хорошо известно, эти термодинамические функции выражаются через статистическую сумму

$$Z_n=\operatorname{sh}\left[\frac{2I+1}{2I}\frac{g_M\mu_B H(r_n)}{kT}\right]\Big/\left\{(2I+1)\operatorname{sh}\left[\frac{g_M\mu_B H(r_n)}{2IkT}\right]\right\} \tag{8}$$

следующим образом:

$$f_n=-T\ln Z_n,\quad \varepsilon_n=-T^2\frac{d(\ln Z_n)}{dT},\quad \mu_n=-\nabla_H f_n. \tag{9}$$

Здесь k — постоянная Больцмана, T = температура.

Если внутри сферы с радиусом связанного состояния дырки помещается большое количество магнитных ионов, то в (8) от суммирования можно перейти к интегрированию

$$\sum_n f_n\simeq 4\pi kTNr_0^3\int_0^\infty d\rho\rho^2\int_0^1 dt\ln\left\{\frac{\operatorname{sh}[(2I+1)r_0^3R_0^2\xi a/2]}{(2I+1)\operatorname{sh}[r_0^3R_0^2\xi a/2]}\right\}, \tag{10}$$

$$\sum_n \varepsilon_n\simeq\varepsilon_{ex}\frac{1}{2I}\int_0^\infty d\rho\rho^2 r_0^3R_0^2\int_0^1 dt\xi\left\{(2I+1)\operatorname{cth}\left[\frac{2I+1}{2}r_0^3R_0^2\xi a\right]-\operatorname{cth}[r_0^3R_0^2\xi a/2]\right\}, \tag{11}$$

$$\sum_n \mu_n\simeq\mathbf{e}_z\cdot\sum_n\mu_{nZ}=\mathbf{e}_Z\cdot g_M\mu_B IN4\pi r_0^3\int_0^\infty d\rho\rho^2\int_0^1 dt\frac{\xi_Z}{\xi}\times\\\times\{(2I+1)\operatorname{cth}[(2I+1)r_0^3R_0^2\xi a/2]-\operatorname{cth}[r_0^3R_0^2\xi a/2]\}. \tag{12}$$

Здесь $\rho=r/r_0$ — радиус, измеренный в единицах r_0; безразмерный параметр a зависит и от r_0 и от температуры T

$$a=\beta/(2\pi r_0^3kT). \tag{13}$$

Отметим, что во всех рассмотренных ниже случаях $(r_0^3R_0^2)$, ξ и ξ_Z являются функциями ρ и не зависят от r_0. Поэтому интегралы (10)—(12) зависят от r_0 лишь через параметр a.

В предельных случаях высокой и низкой температур формулы (10), (11) существенно упрощаются. Так, для $T\to 0$

$$\sum_n f_n=\sum_n\varepsilon_n=\varepsilon_{ex}\int_0^\infty drr^2R_0^2\int_0^1 dt\xi, \tag{14}$$

где $\varepsilon_{ex}=(\beta NI/2)$ — максимальная обменная энергия, достигаемая при $\gamma=1$. В области высоких температур

$$T \gg T_0 = \beta/2\pi r_0^3 k, \tag{15}$$

когда $a = T/T_0 \ll 1$, магнитополяронная энергия обратно пропорциональна температуре

$$\sum_n \varepsilon_n = \frac{1}{2} \sum_n f_n = \varepsilon_{ex} \frac{I+1}{24} q(\gamma) \frac{T_0}{T}, \tag{16}$$

$$q(\gamma) = r_0^3 \int_0^\infty drr^2 R_0^4 \int_0^1 dt \xi^2 = r_0^3 \int_0^\infty drr^2 \left[R_0^4 + \frac{26}{15} R_0^2 R_2^2 - \frac{128}{105} R_2^3 R_0 + \frac{41}{105} R_2^4 \right]. \tag{17}$$

Для определения конкретных зависимостей $\Phi(T)$, $E(T)$, $M(T)$ необходимо подставить в формулы (14)—(17) явные выражения для функций $R_0(r)$ и $R_2(r)$. Вид этих функций зависит от потенциала притяжения носителя к центру. Соответствующие расчеты будут выполнены ниже для двух моделей: 1) кулоновского центра и 2) центра, описываемого потенциалом «нулевого радиуса».

Кулоновский центр. Аналитический вид функций $R_0(r)$ и $R_2(r)$ для кулоновского акцепторного центра известен лишь при $\gamma=1$, когда $m_l=m_h$ и донорные ($\mathcal{J}=1/2$) и акцепторные ($\mathcal{J}=3/2$) состояния не отличаются друг от друга

$$R_0 = \frac{2}{r_B^{3/2}} e^{-r/r_B}, \qquad R_2 = 0. \tag{18}$$

Здесь r_B — боровский радиус связанного состояния. При произвольном γ функции R_0 и R_2 определяют численным интегрированием системы двух дифференциальных уравнений [7]. Однако если $\gamma=0$, то эта система несколько упрощается [10]. А именно одно из уравнений

$$\frac{dR_0}{dr} + \left(\frac{d}{dr} + \frac{3}{r}\right) R_2 = 0 \tag{19}$$

теперь вообще не зависит от характера притяжения к центру и дает универсальную связь между R_0 и R_2 для любого потенциала.

Учет обменного взаимодействия между дыркой и магнитными ионами еще более усложняет задачу. Поэтому ниже расчет характеристик магнитного полярона во всем температурном интервале $(0 < T < \infty)$ будет выполнен лишь в двух предельных случаях $\gamma=0$ и 1, причем для радиальных функций воспользуемся простейшими аппроксимационными выражениями с единственным вариационным параметром — радиусом связанного состояния r_0. При $\gamma=1$ — это функции (18), в которых r_B заменено на r_0, а для $\gamma=0$, учитывая (19), возьмем

$$R_0 = \frac{\sqrt{2}}{r_0^{3/2}} e^{-r/r_0}, \qquad R_2 = \frac{\sqrt{2}}{r_0^{3/2}} \left(\frac{r_0}{r}\right)^3 \left\{ 6 - e^{-r/r_0} \left[\left(\frac{r}{r_0}\right)^3 + 3\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 + 6\left(\frac{r}{r_0}\right) + 6 \right] \right\}, \tag{20}$$

$$\int_0^\infty drr^2 R_0^2 = \int_0^\infty drr^2 R_2^2 = 1/2. \tag{21}$$

В области высоких температур, когда магнитополяронные эффекты малы, полученные результаты будут сопоставлены с расчетами по теории возмущений, в которых использовались R_0 и R_2, найденные численным решением системы дифференциальных уравнений [12] для разных значений γ.

В отсутствие обменного взаимодействия из (18), (20) нетрудно найти явные выражения для кинетической K, потенциальной U и полной ε_h энергий дырки, а также значение радиуса связанного состояния r_0, которое определяется из условия максимальности ε_h. При $\gamma=1$

$$\tilde{K}(1)=\frac{\hbar^2}{2m_h\bar{r}_0^2(1)},\qquad \tilde{U}(1)=-\frac{e^2}{\varkappa\bar{r}_0(1)},\qquad \tilde{\varepsilon}_h(1)=-\frac{1}{2}\frac{m_h e}{\hbar^2\varkappa^2},\qquad \bar{r}_0(1)=\frac{\hbar^2\varkappa}{e^2 m_h},\tag{22}$$

а для $\gamma=0$

$$\tilde{K}(0)=\frac{\hbar^2}{2m_h\bar{r}_0^2(0)},\qquad \tilde{U}(0)=-\frac{Ce^2}{\varkappa\bar{r}_0(0)},\qquad \tilde{\varepsilon}_h(0)=\tilde{\varepsilon}_h(1)C^2,\qquad \bar{r}_0(0)=\bar{r}_0(1)/C,\tag{23}$$

где e — заряд электрона, $\varkappa$ — диэлектрическая проницаемость, $\hbar$ — постоянная Планка, а параметр $C=6\ln(2)-3.5\simeq 2/3$.

Подставляя (18) и (20) в (7), (10)—(13), находим

$$\Phi(\gamma)=\tilde{\varepsilon}_h(\gamma)\left[\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0}\right)^2-2\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0}\right)\right]-\varepsilon_{ex}I_1(a)/a,$$

$$E(\gamma)=\tilde{\varepsilon}_h(\gamma)\left[\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0}\right)^2-2\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0}\right)\right]-\varepsilon_{ex}I_2(a),$$

$$M(\gamma)=g_M\mu_B I4\pi r_0^3 N I_3(a)-\mu_B g_h\frac{3}{2},\tag{24}$$

где

$$I_1(a)=\frac{1}{2I}\int_0^1\frac{dy}{y}\ln^2 y\int_0^1 dt\ln\left\{\frac{\operatorname{sh}\left[\frac{2I+1}{2}ay\xi\right]}{(2I+1)\operatorname{sh}[ay\xi/2]}\right\},$$

$$I_2(a)=\frac{1}{4I}\int_0^1 dy\ln^2 y\int_0^1 dt\xi\,\{(2I+1)\operatorname{cth}[(2I+1)a\xi y/2]-\operatorname{ctg}[ay\xi/2]\},$$

$$I_3(a)=\frac{1}{16}\int_0^1\frac{dy}{y}\ln^2 y\int_0^1 dt\frac{\xi_z}{\xi}\{(2I+1)\operatorname{cth}[(2I+1)ay\xi/2]-\operatorname{cth}[ay\xi/2]\},\tag{25}$$

g_M и g_h — g-факторы магнитных ионов и локализованной дырки.

Значение среднего радиуса магнитного полярона при данной температуре $r_0(\gamma, T)$ определяется условием минимальной свободной энергии

$$\left.\frac{\partial\Phi}{\partial r_0}\right|_{r_0=r_0(\gamma,T)}=\frac{\tilde{\varepsilon}_h(\gamma)}{\bar{r}_0(\gamma)}\left[-2\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0(\gamma,T)}\right)^3-2\left(\frac{\bar{r}_0(\gamma)}{r_0(\gamma,T)}\right)^2\right]+\varepsilon_{ex}\frac{d}{da}\left(\frac{I_1(a)}{a}\right)\frac{da}{dr_0}=0.\tag{26}$$

Это трансцендентное уравнение для r_0 удается решить, если в качестве аргумента взять не температуру T, а параметр a. Тогда, используя соотношение $dI_1(a)/da=I_2(a)$, имеем

$$r_0(\gamma,a)=\bar{r}_0(\gamma)\left[\sqrt{1+2A}-1\right]/A,\qquad A=\frac{3\varepsilon_{ex}(I_1/a-I_2)}{\varepsilon_h(\gamma)}=\frac{3(E-\Phi)}{\varepsilon_h(\gamma)},\tag{27}$$

$$T(a)=\beta/(2\pi r_0^3(\gamma,a)ka).\tag{28}$$

Из (27), (28) видно, что в обоих предельных случаях ($T\to 0$ и $T\to\infty$) $r_0(\gamma, T)\to\bar{r}_0(\gamma)$.[2] При $T\to\infty$ этот результат очевиден и связан просто с исчезновением корреляции между спинами магнитных ионов и локализованной дырки. При $T\to 0$ он является следствием вида пробной функции, для которой среднее значение модуля спина дырки ($\langle|\mathcal{J}|\rangle$) не зависит от r_0. Разность между энергией и свободной энергией в единицах ε_{ex} не превосходит 0.15 и обращается в нуль при $T=0$. На рис. 1 изображена зависимость радиуса полярона для $\gamma=1$ и $\gamma=0$. За единицу длины взято значение $\bar{r}_0(\gamma=1)$, а температура измерена в единицах $T_0(\gamma=1)$ (15). Видно, что для использованных при расчете параметров $Cd_{0.95}Mn_{0.05}Te$

[2] Для электрона на доноре ($\mathcal{J}=1/2$) или дырки на акцепторе ($\mathcal{J}=3/2$) спин частицы является сохраняющейся величиной и не зависит от r_0, поэтому равенство $\lim_{T\to 0} r_0(\gamma,T)=\lim_{T\to\infty} r_0(\gamma,T)=\bar{r}_0(\gamma)$ является точным, а для случая $\mathcal{J}=3/2$, $\gamma=0$ оно, вообще говоря, вытекает из выбора вариационной функции.

($\varepsilon_{ex}/\varepsilon_h$ ($\gamma=1$)$=1$, $\varepsilon_{ex}/\varepsilon_h$ ($\gamma=0$)$=9/4$) r_0 (γ, I) отличается от невозмущенного значения $\tilde{r}_0$ (γ) не более чем на 20 %.

На рис. 2 представлена зависимость от T/T_0 ($\gamma=1$) магнитополяронного сдвига свободной и средней энергии

$$\Delta\Phi = -(\Phi - \bar{\varepsilon}_h(\gamma)), \qquad \Delta E = -(E - \bar{\varepsilon}_h(\gamma)). \tag{29}$$

В полном согласии с результатами общего анализа максимальное значение сдвига дается формулой (14) и достигается при $T=0$. При изменении γ от 1 до 0 сдвиг уменьшается от ε_{ex} до $0.53\varepsilon_{ex}$. Сравнивая этот результат с условием нормировки (21), видим, что с 10-процентной точностью величина эффекта определяется s-компонентой волновой функции ($R_0(r)$).

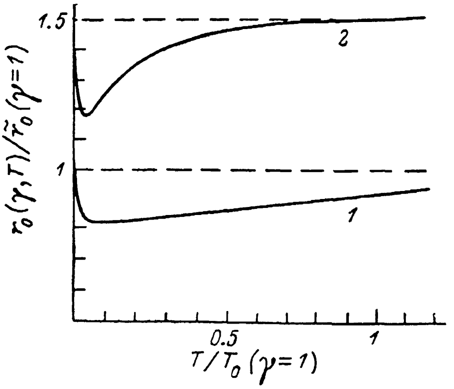

Рис. 1. Зависимость вариационного радиуса r_0 (γ) магнитного полярона, связанного на акцепторном центре кулоновского типа, от температуры для двух значений отношения масс: $\gamma=1$ (*1*) и 0 (*2*).

Радиус измерен в единицах $\tilde{r}_0$ ($\gamma=1$)$=\hbar^2\varkappa/e^2m_h$, а температура — в единицах T_0 ($\gamma=1$)$=$ $=\beta/2\pi r_0^3(\gamma=1)\,k$. Было принято, что $\varepsilon_{ex}/\varepsilon_h(\gamma=1)=1$ и $\varepsilon_{ex}/\varepsilon_h$ ($\gamma=0$)$=9/4$ (см. (27)) (параметры $Cd_{0.95}Mn_{0.05}Te$).

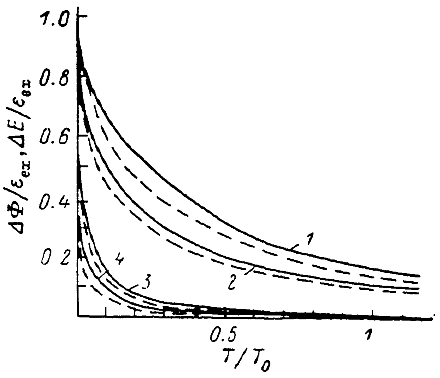

Рис. 2. Магнитополяронный сдвиг энергии кулоновского акцептора (в единицах $\varepsilon_{ex}=\beta NI/2$) как функция температуры (в единицах T_0 ($\gamma=1$)).

Кривые *1* (энергия) и *2* (свободная энергия) относятся к зоне с $\gamma=1$, а кривые *3* и *4* — к аналогичным величинам в зоне с $\gamma=0$. Штрихами изображены те же зависимости, рассчитанные без учета изменения радиуса акцепторного состояния обменным взаимодействием. Зависимости *3* и *4* можно приближенно получить из *1* и *2*, если уменьшить у последних масштаб по обеим осям в два раза, что эквивалентно уменьшению в два раза эффективной константы обменного взаимодействия при изменении γ от 1 до 0.

О том же свидетельствует расчет в высокотемпературной области, где величина сдвига дается формулой (16). Входящий в эту формулу параметр q (17) для $\gamma=1$ равен 1, а для $\gamma=0$

$$q\,(0) \simeq 0.28 \approx r_0^3 \int\limits_0^\infty dr r^2 R_0^4 = 0.25. \tag{30}$$

Кроме q, в высокотемпературной формуле (16) от γ зависит радиус связанного состояния r_0 (γ), который входит в выражение для T_0 (15). Согласно (22), (23), $\tilde{r}_0$ (0)$\approx 1.5\tilde{r}_0$ (1). Нетрудно найти, что полная зависимость ΔE от γ описывается функцией

$$p\,(\gamma) = \frac{\Delta E\,(\gamma)}{\Delta E\,(1)} = q\,(\gamma)\,\frac{\tilde{r}_0^3\,(1)}{\tilde{r}_0^3\,(\gamma)}. \tag{31}$$

Расчет p (γ) был выполнен как для предельных значений $\gamma=1$ и 0 с использованием функций (18), (19), так и с функциями R_0 и R_2, найденными для произвольного значения γ численным интегрированием системы дифференциальных уравнений для радиальных функций [12]. Для двух предельных случаев имеем: p (1)$=1$, p (0)$=0.074$ (рис. 3). Оба значения совпадают как с результатами численного расчета, так и с численными оценками, учитывающими лишь s-компоненту волновой функции. Это дает основание утверждать, что при любом отношении масс основной вклад в обменное взаимодействие дает s-составляющая волновой функции дырки. Другими словами, характеристики магнитного полярона при произвольном γ можно получить, используя волновою функцию вида (18) и считая, что эффективная константа обменного взаимодействия β^* зависит от γ' (рис. 3)

$$\beta^*(\gamma) = \beta \int_0^\infty dr r^2 R_0^2(r, \gamma). \tag{32}$$

Центр, описываемый потенциалом «нулевого радиуса». Модель потенциала «нулевого радиуса» обычно используется для описания глубоких примесных центров, когда радиус действия притягивающего потенциала мал по сравнению с характерным размером волновой функции связанного состояния. В рамках этой модели удается найти явное выражение для функции связанного состояния как вблизи экстремумов валентной зоны и зоны проводимости, так и в глубине запрещенной зоны [13]. Если энергия связи носителя на центре ε_0 велика по сравнению с обменной энергией ε_{ex}, то можно приближенно считать, что магнитополяронный эффект не изменяет вида волновой функции связанного состояния. Тогда, рассматривая для простоты состояния вблизи вершины валентной зоны ($\mathcal{J}=3/2$), имеем

$$R_0 = \frac{1}{r_0^{3/2}(1+\gamma^{3/2})^{1/2}} \frac{e^{-\rho}}{\rho}\left[\gamma e^{\rho(1-\sqrt{\gamma})}+1\right],$$

$$R_2 = \frac{1}{r_0^{3/2}(1+\gamma^{3/2})^{1/2}} \frac{e^{-\rho}}{\rho}\left[\left(\gamma+\frac{3}{\rho}\sqrt{\gamma}+\frac{3}{\rho^2}\right)e^{\rho(1-\sqrt{\gamma})}-\left(1+\frac{3}{\rho}+\frac{3}{\rho^2}\right)\right]. \tag{33}$$

Здесь $r_0=\hbar^2/\sqrt{2m_h\varepsilon_0}$ — радиус тяжелой дырки, $\rho=r/r_0$. При $\gamma=1$, $R_2=0$, а R_0 переходит в обычную волновую функцию центра с потенциалом «нулевого радиуса» [13].

Подставляя (33) в (10)—(13), несложно найти общее выражение для сдвига уровня и магнитного момента полярона. Получаемые формулы во многом аналогичны (24), (25), но в силу приближения $\varepsilon_0 \gg \varepsilon_{ex}$ параметр r_0 теперь просто совпадает со значением радиуса волновой функции в отсутствие обменного взаимодействия. Расчет магнитополяронного сдвига показывает, что максимальные значения сдвига достигаются при $T=0$ и близки к соответствующим величинам для кулоновского центра: $\Delta E = \Delta\Phi = \varepsilon_{ex}$ при $\gamma=1$ и $\Delta E=\Delta\Phi \simeq 0.56\varepsilon_{ex}$ при $\gamma=0$. Однако в определяемой условием (15) высокотемпературной области различия между рассматриваемыми моделями носят даже не количественный, а качественный характер.

Если для кулоновского центра в полном согласии с общей формулой (16) $\Delta E \sim \Delta\Phi \sim T^{-1}$, то для центра «нулевого радиуса» зависимость магнитополяронного сдвига от температуры оказывается более слабой $\Delta E \sim \Delta\Phi \sim T^{-1/2}$. Проиллюстрируем это на примере сдвига средней энергии ΔE. Как нетрудно понять, качественное отличие центра, описываемого потенциалом «нулевого радиуса», связано с тем, что радиальные функции (33) ведут себя в окрестности центра как $1/\rho$, интеграл (17) расходится на нижнем пределе. Т. е. всегда имеется область, где несправедливо высокотемпературное разложение и при расчетах следует использовать точную формулу (11). Поскольку при $T \gg T_0$ ($a \ll 1$) основной вклад в магнитополяронный сдвиг вносят магнитные примеси, расположенные вблизи центра ($r \ll r_0$), при вычислении интеграла (11) можно пренебречь экспоненциальными сомножителями R_i. Тогда, вводя новую переменную $y=r/(\sqrt{a}r_0)$, имеем

$$\Delta E = \varepsilon_{ex}\sqrt{\frac{T_0}{T}}\frac{1}{2I}\int_0^\infty dy\int_0^1 d\xi\,\xi\left\{(2I+1)\,\mathrm{cth}\left[\frac{2I+1}{2}\frac{\xi}{y^2}\right]-\mathrm{cth}\left[\frac{\xi}{2y^2}\right]\right\}. \tag{34}$$

Подынтегральная функция здесь не зависит от a и вся зависимость от температуры связана с явно выписанным множителем $\sqrt{T_0/T}$. Это справедливо до тех пор, пока основной вклад в интеграл дает область, содержащая достаточно большое число магнитных ионов (справедливо континуальное приближение). Радиус этой области убывает как $T^{-1/2}$ ($r_c \simeq$

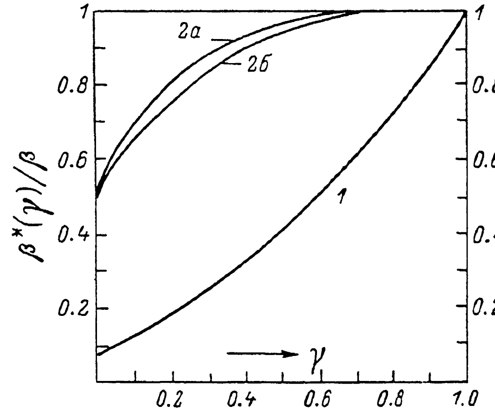

Рис. 3. Зависимость магнитополяронного сдвига энергии кулоновского акцептора при высоких температурах (в единицах сдвига при $\gamma=1$) $p(\gamma)=\Delta E(\gamma)/\Delta E(1)$ от отношения масс $\gamma=m_l/m_h$ (кривая 1). Зависимость от отношения масс эффективной константы обменного взаимодействия в единицах β (кривая 2). $\beta^*(\gamma)/\beta = \int_0^\infty dr r^2 R_0^2(r, \gamma)$ — вероятность пребывания в s-состоянии для дырки, связанной на а) кулоновском центре, б) центре с потенциалом «нулевого радиуса».

$\simeq r_0\sqrt{T_0/T}$). Если $r_c < r_N = N^{-1/3}$, то для взаимодействия со всеми магнитными ионами справедливо высокотемпературное приближение. Тогда ΔE дается формулой (16), но в интеграле (17) нижний предел следует сдвинуть от нуля на величину r_N.

Расчет показывает, что для центра, описываемого потенциалом «нулевого радиуса», как и для кулоновского центра, справедлив вывод о том, что основной вклад в обменное взаимодействие дырки с системой магнитных ионов вносит s-компонента волновой функции дырки. Зависимость $\beta^*(\gamma)/\beta$, рассчитанная с функцией (33), приведена на рис. 3 (кривая 2б).

Магнитный момент спинового полярона.

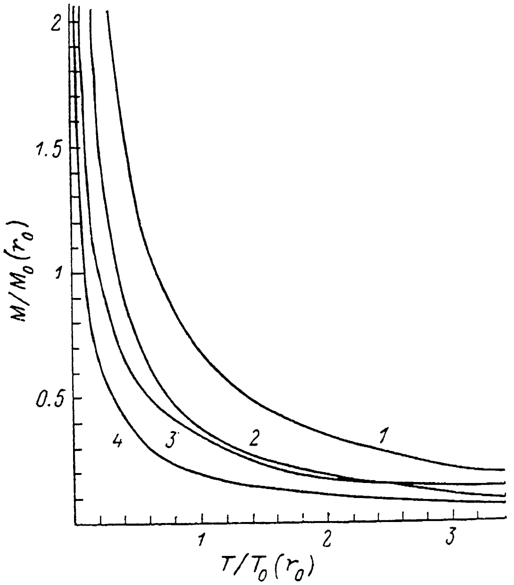

Рис. 4. Зависимость от температуры (в единицах T_0, формула (15)) полного момента магнитного полярона M (в единицах $M_0 = Ig_M\mu_B 4\pi N r_0^3$), связанного на акцепторном центре кулоновского типа с $\gamma=1$ и $\gamma=0$ (кривые 1 и 2) и на центре с потенциалом «нулевого радиуса» с $\gamma=1$ и $\gamma=0$ (кривые 3 и 4).

Единицы измерения зависят от радиуса связанного состояния r_0.

На рис. 4 представлены рассчитанные по (12) температурные зависимости магнитного момента полярона M. За единицу M взято значение суммарного магнитного момента ионов, расположенных внутри радиуса акцепторного состояния $M_0 = Ig_M\mu_B 3\pi N r_0^3$, а температура измерена в единицах T_0 (15).[3] Расчеты проводились для обоих типов центров и двух значениях параметра $\gamma=0$ и $\gamma=1$. Для исследовавшегося в [11] центра

[3] Следует иметь в виду, что при достаточно больших магнитополяронных сдвигах r_0 само зависит от температуры. Однако для $Cd_{0.95}Mn_{0.05}Te$ зависимость $r_0(T)$ слабая и не приводит к заметному изменению момента при заданной температуре.

в $Cd_{1-x}Mn_xTe$, если считать его близким к центру с потенциалом «нулевого радиуса», $T_0=23$ К и $M_0=Tg_M\mu_B x\cdot 867$, а для кулоновского центра в том же кристалле $T_0(\gamma=1)=46$ К, $M_0(\gamma=1)=Ig_M\mu_B x\cdot 433$, $T_0(\gamma=0)=14$ К, $M_0(\gamma=0)=Ig_M\mu_B x\cdot 1500$. Видно, что различия зависимостей $M(T)$ носят лишь количественный характер. В высокотемпературной области $M\sim\sim M_0T_0/T$. При $T\to 0$, $M\to\infty$. Это связано с тем, что в рассчитанной модели при малых температурах радиус области, в которой спины магнитных ионов выстроены вдоль обменного поля r_M, стремится к бесконечности. Как показано в [11], учет антиферромагнитного взаимодействия между магнитными ионами приводит к конечным значениям r_M и M при $T=0$ К.

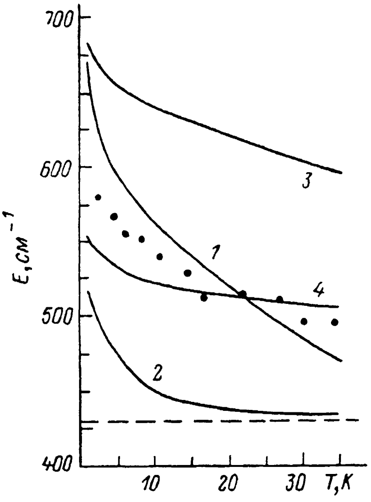

Рис. 5. Зависимость энергии акцептора в $Cd_{0.95}Mn_{0.05}Te$ от температуры.

Δ — эксперимент [11]. Сплошные линии — расчет для кулоновского акцептора при: *1* — $\gamma=1$, *2* — $\gamma=0$ и центра с потенциалом «нулевого радиуса» с: *3* — $\gamma=1$ и *4* — $\gamma=0$ (с учетом зависимости $x'(x)$).

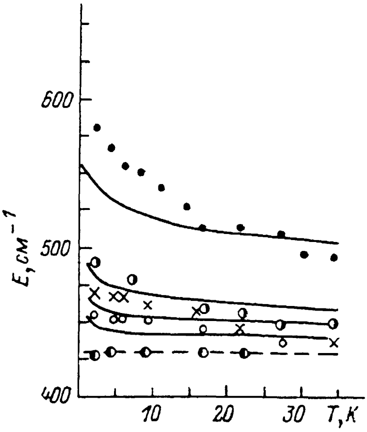

Рис. 6. Энергия акцептора как функция температуры для кристаллов $Cd_{1-x}Mn_xTe$ [11] со следующими значениями x.

Черные точки — $x=0.05$, бело-черные — $x=0.02$, крестики — $x=0.01$, кружки — $x=0.005$, черно-белые — чистый CdTe. Сплошные линии — результат соответствующего расчета для акцептора с потенциалом «нулевого радиуса» при $\gamma=0.1$.

2. Интерпретация эксперимента

В [11] для кристаллов $Cd_{1-x}Mn_xTe$ p-типа с различными значениями x измерена зависимость средней энергии основного состояния дырки на акцепторе от температуры. Исследованные кристаллы имеют кубическую гранецентрированную катионную подрешетку с периодом $a_0=6.46$ Å. Акцепторный уровень в CdTe имеет энергию $\varepsilon_A=54$ мэВ. Эта величина значительно превышает энергию акцептора кулоновского типа с соответствующими параметрами материала ($m_h/m_0=0.4$, где m_0 — масса свободного электрона, $\varkappa=10$, $\gamma=m_l/m_h=0.1\ll 1$).

$$\varepsilon_h(\gamma=0)\simeq\frac{1}{2}\frac{m_he^4}{\hbar^2\varkappa^2}\frac{4}{9}=23.6\text{ мэВ}. \tag{35}$$

На рис. 5 представлены экспериментальная и теоретические зависимости энергии акцептора от температуры. Расчетные кривые *1*, *2* относятся соответственно к кулоновскому центру с $\gamma=1$ и $\gamma=0$, а кривые *3*, *4* к центру «нулевого радиуса» с $\gamma=1$ и $\gamma=0$. Из рис. 5 видно, что, поскольку в рассматриваемом материале $\gamma\ll 1$, кулоновский центр не подходит для описания магнитного полярона в данном случае, в то время как центр с потенциалом «нулевого радиуса» $\gamma=0$ дает неплохое согласие с экспериментом. Такой результат согласуется с выводом, сделанным по оценке энергии кулоновского акцептора, о том, что изучаемый центр глубокий.

На рис. 6 экспериментальные зависимости энергии акцептора от температуры для кристаллов четырех составов [11] сопоставляются с результатами расчета, выполненного для центра «нулевого радиуса» с $\gamma=0.1$ (кривые для $\gamma=0.1$ и $\gamma=0$ очень близки).[4] Различие между теорией и экспериментом (15—20 %) находится в рамках точности сделанных выше приближений: континуального приближения, использования неизменной волновой функции дырки, неучета перпендикулярных к локальному направлению обменного поля составляющих спинов магнитных ионов.

Литература

[1] *Кривоглаз М. А.* УФН, 1973, т. 111, № 4, с. 627—654; *Нагаев Э. Л.* Физика магнитных полупроводников. М.: Наука, 1979. 432 с.

[2] *Warnock J., Wolff P. A.* Phys. Rev. B, 1985, vol. 31, N 10, p. 6579—6587.

[3] *Dietl T., Spatek J.* Phys. Rev. B, 1983, vol. 28, N 3, p. 1548—1563.

[4] *Рябченко С. М., Семенов Ю. Г.* ЖЭТФ, 1983, т. 84, № 4, с. 1419—1431.

[5] *Берковская Ю. Ф., Вахабова Э. М., Гельмонт Б. Л., Меркулов И. А.* ЖЭТФ, 1988, т. 94, № 4, с. 183—195.

[6] *Бир Г. Л., Пикус Г. Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 735 с.

[7] *Гельмонт Б. Л., Дьяконов М. И.* ФТП, 1971, т. 5, № 11, с. 2191—2193.

[8] *Гельмонт Б. Л., Меркулов И. А., Берковская Ю. Ф., Вахабова Э. М.* В сб.: Материалы VII Всес. симпозиума «Полупроводники с узкой запрещенной зоной и полуметаллы». Львов, 1986, ч. 2, с. 9—11.

[9] *Isaacs E. D., Wolff P. A.* 18th Intern. Conf. Phys. of Semiconductors. Stocholm, 1986, vol. 2, p. 1791—1794.

[10] *Берковская Ю. Ф., Гельмонт Б. Л., Цидильковский Э. И.* ФТП, 1988, № 4, с. 142—154.

[11] *Nhung T. H., Planel R., Benoit a'la Guillaume C.* Phys. Rev. B, 1985, vol. 31, N 4, p. 2388—2395.

[12] *Beinikhes I. L., Kogan Sh. M., Polupanov A. F., Taskinboev R.* Sol. St. Commun., 1984, vol. 53, N 12, p. 1083—1087.

[13] *Демков Ю. Н., Островский В. Н.* Метод потенциалов «нулевого радиуса» в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 205 с.

[14] *Shapiro Y., Forner S., Ridgley D. H.* et al. Phys. Rev. B, 1984, vol. 30, N 7, p. 4021—4023.

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

Поступило в Редакцию
16 февраля 1988 г.

---

[4] При расчетах мы учли, что антиферромагнитное взаимодействие эффективно уменьшает концентрацию магнитных ионов так, что вместо x следует использовать меньшую величину x' (x), найденную в [14]. Применимость этой зависимости в исследуемом случае проверялась.