ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЛЕГКИХ И ТЯЖЕЛЫХ ДЫРОК В РАЗБАВЛЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Поморцев Р. В., Заболоцкий Е. И.

Исследовано влияние обменного взаимодействия на энергетический спектр легких и тяжелых дырок в сферической модели Латтинджера. В энергии обменного взаимодействия, кроме гайзенберговского инварианта, учитывались также инварианты, пропорциональные k^2. Показано, что в парамагнитном случае главные значения тензора эффективных масс зависят от намагниченности. Получены также аналитические выражения для энергии уровней Латтинджера в случае квантующих магнитных полей.

1. Как известно, для описания энергетического спектра разбавленных магнитных полупроводников (РМП) со структурой цинковой обманки в магнитном поле широко используется модель, предложенная в работах [1, 2]. В этой модели считается, что электроны незаполненных оболочек ионов переходного элемента ответственны за формирование локализованного магнитного момента, а их взаимодействие с носителями тока учитывается добавлением к гамильтониану полупроводниковой матрицы энергии обменного взаимодействия, которая выбирается в следующем виде:

$$\mathscr{H}^{\text{обм}}(\mathbf{r}) = -\sum_i I(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)\,\mathbf{S}_i\mathbf{j}, \tag{1}$$

где $I(r-R_i)$ — обменный интеграл, центрированный на i-узле кристаллической решетки, $\mathbf{S}$ — оператор полного спина локализованного магнитного момента, $\mathbf{j}$ — оператор полного момента электрона.

В приближении молекулярного поля учет обменного взаимодействия вызывает расщепление и частичную деформацию зон в точке Г. В частности, зона Γ_6 расщепляется на две зоны без изменения кривизны каждой из расщепленных зон, а в четырехкратно вырожденной зоне Γ_8 происходят как расщепление, так и деформация поверхностей постоянной энергии, которые из сфер (без учета гофрировки) превращаются в эллипсоиды вращения [3].

В данной работе мы ограничимся изучением влияния обменного взаимодействия в РМП на электронный спектр в четырехкратно вырожденной зоне Γ_8, которую в сферическом приближении будем описывать гамильтонианом Латтинджера, а обменное взаимодействие учтем с точностью до членов, пропорциональных k^2.

2. В приближении виртуального кристалла, применение которого для РМП основано на анализе экспериментальных данных [2], общий вид гамильтониана обменного взаимодействия в k-представлении можно записать методом инвариантов. В случае четырехкратно вырожденной зоны такой гамильтониан представляет собой матрицу размерностью 4×4, которая образована из квадратичных комбинаций волнового вектора k, оператора полного спина локализованного момента S и некоторого набора линейно независимых матриц. В качестве базиса можно взять, как обычно, матрицы J_x, J_y и J_z, которые являются матричными элементами оператора полного момента частицы со спином $^3/_2$,

и некоторые их произведения [4]. В этом случае гамильтониан обменного взаимодействия $\mathscr{H}^{\text{обм}}(k)$ в линейном по взаимодействию приближении будет иметь вид

$$\mathscr{H}^{\text{обм}}(k) = -{}^1/_3 xN_0 [\beta_0 + k^2\beta_1] (\langle \mathbf{S} \rangle \cdot \mathbf{J}) - xN_0\beta_2 [(\langle \mathbf{S} \rangle \mathbf{k}) (\mathbf{k} \cdot \mathbf{J}) + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{J}) (\langle \mathbf{S} \rangle \mathbf{k})] + xN_0\beta_3 [(\langle \mathbf{S} \rangle \mathbf{J}) (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 (\langle \mathbf{S} \rangle \mathbf{J})]. \quad (2)$$

Здесь x — молярная концентрация ионов переходных элементов, N_0 — число элементарных ячеек в единице объема, константы β_i (i=0, 1, 2, и 3) представляют собой параметры обменного взаимодействия локализованных d-состояний с p-состояниями валентной зоны. При написании $\mathscr{H}^{\text{обм}}(k)$ мы избавились от оператора $\mathbf{S}$, заменив его термодинамическим средним $\langle \mathbf{S} \rangle$, что фактически означает использование приближения молекулярного поля.

В выражении (2), кроме параметра β_0, который в теории РМП хорошо известен [1, 2], появились три новых параметра β_1, β_2 и β_3, что указывает на негайзенберговский характер обмена в рассматриваемом случае. Отметим, что в теории магнетизма такая ситуация хорошо известна и детально исследована [5, 6].

Задача вычисления констант обменного взаимодействия β_i выходит за рамки данной работы, поэтому, считая их параметрами теории, перейдем непосредственно к определению энергетического спектра носителей тока в зоне Γ_8.

3. Рассмотрим случай, когда магнитное поле не оказывает влияния на орбитальное движение носителей тока. В частности, такая ситуация может реализоваться в широкозонных РМП типа $Cd_{1-x}Mn_xTe$ либо в ферромагнитных полупроводниках типа $CdCr_2Se_4$, когда эффективные массы дырок в них достаточно велики.

Выберем направление магнитного поля вдоль оси z. Тогда в парамагнитной области, когда $\langle S_x \rangle = \langle S_y \rangle = 0$, величина $\langle S_z \rangle$ пропорциональна намагниченности, гамильтониан для четырехкратно вырожденной валентной зоны в сферическом приближении имеет вид

$$\mathscr{H} = \frac{\hbar^2}{2m_0} [-(\gamma_1 + {}^5/_2\gamma) k^2 + 2\gamma (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2] - {}^1/_3 xN_0 [\beta_0 + k^2\beta_1] \langle S_z \rangle J_z - 2xN_0\beta_2 \langle S_z \rangle k_z (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k}) + xN_0\beta_3 \langle S_z \rangle [J_z (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 + (\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 J_z], \quad (3)$$

где γ и γ_1 — параметры Латтинджера, m_0 — масса свободного электрона.

В явном виде закон дисперсии можно найти лишь для выделенных направлений квазиимпульса дырки.

а) $\mathbf{k} \parallel \mathbf{H}$. В этом случае для легких и тяжелых дырок получим

$$\varepsilon_{hh}(k_z) = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - 2\gamma) + {}^1/_3 m_j xN_0\beta'_\parallel \langle S_z \rangle\right] k_z^2 + {}^1/_3 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle \quad (4а)$$

$(m_j = \pm{}^3/_2)$,

$$\varepsilon_{lh}(k_z) = \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + 2\gamma) + m_j xN_0\beta''_\parallel \langle S_z \rangle\right] k_z^2 + {}^1/_3 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle \quad (4б)$$

$(m_j = \pm{}^1/_2)$, где $\beta'_\parallel = \beta_1 + 6\beta_2 - {}^{27}/_2\beta_3$, $\beta''_\parallel = \beta_1 + 6\beta_2 - {}^3/_2\beta_3$.

б) $\mathbf{k} \perp \mathbf{H}$. В плоскости, перпендикулярной магнитному полю, зависимость является явно непараболической:

$$\varepsilon_{hh}(k_\perp) = [\gamma_1 + {}^1/_6 m_j xN_0 (\beta'_\perp - \beta''_\perp) \langle S_z \rangle] k_\perp^2 + {}^1/_9 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle + \sqrt{([\gamma + {}^1/_6 m_j xN_0 (\beta'_\perp + \beta''_\perp) \langle S_z \rangle] k_\perp^2 + {}^1/_2 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle)^2 + 3k^4 \left(\gamma + \frac{m_j}{3} x\beta_3 \langle S_z \rangle\right)^2} \quad (5а)$$

$(m_j = \pm{}^3/_2)$,

$$\varepsilon_{lh}(k_\perp) = [\gamma_1 + {}^1/_2 m_j xN_0 (\beta'_\perp - \beta''_\perp) \langle S_z \rangle] k_z^2 + {}^1/_3 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle - \sqrt{([\gamma + {}^1/_2 m_j xN_0 (\beta'_\perp + \beta''_\perp) \langle S_z \rangle] k_\perp^2 + {}^2/_3 m_j xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle) + 3k_\perp^4 (\gamma + m_1 xN_0\beta_0 \langle S_z \rangle)^2} \quad (5б)$$

$(m_j = \pm{}^1/_2)$, где $\beta'_\perp = \beta_1 - {}^9/_2\beta_3$, $\beta''_\perp = {}^1/_3\beta_1 + {}^7/_2\beta_3$.

При $k_\perp \to 0$ зависимость $\varepsilon(k_\perp)$ приобретает квадратичный характер:

$$\varepsilon^{\pm}_{hh}(k_\perp)=\frac{\hbar^2}{2}[m^{hh}_\perp]^{-1}_{\pm}k^2_\perp\pm{}^1/_2 xN_0\beta_0\langle S_z\rangle,$$
$$\varepsilon^{\pm}_{lh}(k_\perp)=\frac{\hbar^2}{2}[m^{lh}_\perp]^{-1}_{\pm}k^2_\perp\pm{}^1/_6 xN_0\beta_0\langle S_z\rangle, \tag{6}$$

где поперечные эффективные массы легких и тяжелых дырок на дне зоны определяются следующими выражениями:

$$[m^{hh}_\perp]^{-1}_{\pm}=(\gamma_1+\gamma)\pm\frac{m_0}{\hbar^2}xN_0\beta'_\perp\langle S_z\rangle,$$
$$[m^{lh}_\perp]^{-1}_{\pm}=(\gamma_1-\gamma)\pm\frac{m_0}{\hbar^2}xN_0\beta''_\perp\langle S_z\rangle. \tag{7}$$

4. В достаточно сильном магнитном поле либо в случае, когда эффективные массы дырок малы, необходимо учесть, что орбитальное движение таких носителей в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, имеет квантовый характер.

Пусть, как и в предыдущем случае, магнитное поле направлено вдоль оси z. Кроме того, для простоты ограничимся здесь рассмотрением задачи получения энергетического спектра при $k_z=0$ (уровни Латтинджера).

В присутствии магнитного поля величины k_x и k_y являются операторами, которые удовлетворяют правилам коммутации

$$[k_x, k_y]=-i\alpha^{-2}(H_z/H), \tag{8}$$

где $\alpha=\sqrt{c\hbar/EH}$ — магнитная длина.

Введем, как обычно, вместо операторов k_x и k_y операторы рождения и уничтожения a^+ и a [7]:

$$k_x=\frac{1}{\sqrt{2}\,\alpha}(a^++a),\quad k_y=-\frac{i}{\sqrt{2}\,\alpha}(a^+-a). \tag{9}$$

Тогда для оператора энергии легких и тяжелых дырок получим

$$\mathscr{H}=\mathscr{H}_0+\mathscr{H}^{\text{обм}}, \tag{10}$$

где $\mathscr{H}_0$ — гамильтониан Латтинджера, записанный через операторы a^+ и a [7], а $\mathscr{H}^{\text{обм}}$ имеет вид

$$\mathscr{H}^{\text{обм}}=-{}^1/_3 xN_0\beta_0\langle S_z\rangle J_z-{}^2/_3\alpha^{-2}xN_0\beta_1\langle S_z\rangle(a^+a+{}^1/_2)+$$
$$+\frac{1}{\alpha^2}xN_0\beta_3\langle S_z\rangle[(a^{+2}+a^2)\{J_z, (J_x^2-J_y^2)\}+4(a^+a+{}^1/_2)J_z[J^2-J_z^2]-2J_z^2-$$
$$-4i(a^{+2}-a^2)\{J_z\{J_x, J_y\}\}], \tag{11}$$

где $\{A, B\}={}^1/_2\{AB+BA\}$.

Из (10) и (11) следует, что уровни энергии легких и тяжелых дырок для $n\geqslant1$ даются следующими выражениями:

$$\varepsilon^{\pm}_{hh}(n)=\hbar\Omega_0\left\{A^{\pm}(n)+\sqrt{[B^{\pm}(n)]^2+3n(n+1)\frac{m_0}{\hbar^2}[xN_0\beta_3\langle S_z\rangle]^2}\right\},$$
$$\varepsilon^{\pm}_{lh}(n)=\hbar\Omega_0\left\{A^{\pm}(n)-\sqrt{[B^{\pm}(n)]^2+3n(n+1)\frac{m_0}{\hbar^2}[xN_0\beta_3\langle S_z\rangle]^2}\right\}. \tag{12}$$

Здесь $\hbar\Omega_0=\hbar(eH/m_0c)$, n — целое положительное число, удовлетворяющее условию $n\geqslant1$,

$$A^{\pm}(n)=\gamma_1(n+{}^1/_2)\mp\gamma\pm\frac{m_0}{2\hbar^2}xN_0[(\beta'_\perp-\beta''_\perp)(n+{}^1/_2)\mp(\beta'_\perp+\beta''_\perp)]\langle S_z\rangle\pm$$
$$\pm{}^1/_6 xN_0\beta_0\frac{\langle S_z\rangle}{\hbar\Omega_0}+{}^5/_4\frac{m_0}{\hbar^2}xN_0\beta_3\langle S_z\rangle,$$
$$B^{\pm}(n)=\gamma(n+{}^1/_2)\mp\gamma_1\pm\frac{m_0}{2\hbar^2}xN_0[(\beta'_\perp+\beta''_\perp)(n+{}^1/_2)\mp(\beta'_\perp-\beta''_\perp)]\langle S_z\rangle\pm$$
$$\pm{}^1/_3 xN_0\beta_0\frac{\langle S_z\rangle}{\hbar\Omega_0}+\frac{m_0}{\hbar^2}xN_0\beta_3\langle S_z\rangle. \tag{13}$$

Кроме выписанных уровней с $n \geqslant 1$, в спектре энергий, определяемом гамильтонианом (10), имеются еще четыре уровня с $n=-1$ и 0 — по два для каждого из значений $m_j={}^1/_2$ и $-{}^3/_2$:

$$\varepsilon(n) = \hbar\Omega_0 \left\{ \left[(\gamma_1 - \gamma) - \frac{m_0}{\hbar^2} x N_0 \beta''_\perp \langle S_z \rangle \right] (n + {}^3/_2) - \right.$$
$$\left. - {}^1/_6 x N_0 \beta_0 \frac{\langle S_z \rangle}{\hbar\Omega_0} + {}^1/_4 \frac{m_0}{\hbar^2} x N_0 \beta_3 \langle S_z \rangle \right\} \tag{14a}$$

$(m_j = {}^1/_2)$,

$$\varepsilon(n) = \hbar\Omega_0 \left\{ \left[(\gamma_1 + \gamma) - \frac{m_0}{\hbar^2} x N_0 \beta''_\perp \langle S_z \rangle \right] (n + {}^3/_2) - \right.$$
$$\left. - {}^1/_2 x N_0 \beta_0 \frac{\langle S_z \rangle}{\hbar\Omega_0} + {}^9/_4 \frac{m_0}{\hbar^2} x N_0 \beta_3 \langle S_z \rangle \right\} \tag{14б}$$

$(m_j = -{}^3/_2)$.

5. В заключение сделаем некоторые оценки и сформулируем основные выводы. Величины полученных эффектов найдем, исходя из предположения, что волновые функции электронов незаполненных d-оболочек сильно локализованы. В этом случае можно считать, что $\beta_1 \approx \beta_2 \approx \beta_3 \approx a_0^2\beta_0$, где a_0 — радиус локализации. В результате, например, для $\beta'_\parallel$ и $\beta''_\parallel$ получим

$$\beta'_\parallel \approx -6.5 a_0^2 \beta_0, \quad \beta''_\parallel \approx 5.5 a_0^2 \beta_0.$$

Из выражения (4) нетрудно увидеть, что перенормировка продольных эффективных масс, в частности, тяжелых дырок равна

$$[m_\parallel^{hh}]_\pm = (\gamma_1 - 2\gamma) \pm \frac{m_0}{\hbar^2} N_0 \beta'_\parallel \langle S_z \rangle x = (\gamma_1 - 2\gamma) \mp 3 \frac{N_0 \beta_0}{E_0} \langle S_z \rangle x, \tag{15}$$

где $E_0 = \hbar^2/2m_0 a_0^2$. Для оценок можно считать, что $N_0\beta_0 = 1$ эВ, а для d-состояний марганца энергия E_0 при $a_0 = 1 \cdot 10^{-8}$ см составляет величину порядка 4 эВ. Таким образом, учет негайзенберговского характера обменного взаимодействия приводит к перенормировке эффективных масс, которая пропорциональна отношению двух больших энергий и в принципе может быть не очень малой.

Основные результаты работы заключаются в следующем.

1) В случае классически сильных магнитных полей (магнитное поле не влияет на характер орбитального движения) учет негайзенберговского характера обменного взаимодействия в РМП приводит к исчезновению конгруэнтности расщепленных зон как легких, так и тяжелых дырок, а главные значения тензора эффективных масс становятся зависящими от величины намагниченности.

2) В случае квантующих магнитных полей возникает нелинейная зависимость уровней Латтинджера от величины $\langle S_z \rangle$ и, следовательно, от намагниченности.

Список литературы

[1] Kossut J. // Phys. St. Sol. (b). 1976. V. 78. P. 537—541.
[2] Bastard G. // Proc. Int. Conf. Phys. Narrow Gap Semicond. Warsaw. 1977. P. 63—79.
[3] Gaj J. A., Ginter J., Galazka R. R. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 89. N 2. P. 655—662.
[4] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 640 с.
[5] Ирхин Ю. П. // ЖЭТФ. 1966. Т. 50. В. 2. С. 379—388.
[6] Звездин А. К., Матвеев В. М., Мухин А. А., Попов А. И. Редкоземельные ионы в магнитоупорядоченных кристаллах. М., 1985.
[7] Luttinger G. M. // Phys. Rev. 1956. V. 102. N 2. P. 1030—1041.

Институт физики металлов УрО АН СССР
Свердловск

Получена 12.01.1989
Принята к печати 29.05.1989