ЭНЕРГИЯ СВЯЗИ ЭКСИТОНОВ В МАГНИТОСМЕШАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Семенов Ю. Г., Стефанович В. А.

Для гексагонального магнитосмешанного полупроводника (МСП), энергетические зоны которого расщеплены по спину эффективным обменным полем G, решена задача об энергии связи экситонов R^{ex}, образованных носителями заряда из определенных спиновых подзон. Показано, что в актуальном случае H ∥ c_6 (H — внешнее магнитное поле, c_6 — ось 6-го порядка МСП) поле G (∥ H) может заметно повлиять на эффективные массы в B- и C-дырочных подзонах, при этом для разных спиновых состояний по-разному. В результате появляется зависимость R^{ex} от G для экситонов, соответствующих данным дырочным подзонам. Численные оценки, проведенные для $Cd_{1-x}Mn_xS$, показали, что энергия связи экситонов, зависящая от магнитного поля, заметно изменяет расщепление π-компонент экситонных переходов.

1. Исследования оптических спектров экситонов продолжают оставаться одним из основных источников новой информации о зонной структуре магнитосмешанных полупроводников (МСП) и константах носительного обменного взаимодействия J. При этом наблюдаемые в магнитном поле **H** при низких температурах гигантские спиновые расщепления (ГСР) экситонных спектров отражения обычно описываются как результат проявления обменного взаимодействия носителей заряда, связанных в экситон, с магнитными ионами в приближении среднего поля $\mathbf{G}_{e\,(h)}$ (индексы e и h относятся к электрону и дырке соответственно). Соответствующие ГСР энергетических зон МСП в этом приближении описывает квазизеемановский гамильтониан $\mathcal{H}_e = \mathbf{G}_b \mathbf{S}_b$, где $\mathbf{S}_b$ — спин электрона ($b=e$) либо дырки ($b=h$):

$$\mathbf{G}_b = -J_b x \langle \mathbf{S}_l \rangle. \tag{1}$$

Здесь x — степень замещения катионов в МСП типа $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ на магнитные ионы, $\langle \mathbf{S}_l \rangle$ — среднее значение вектора спинового момента, наведенного внешним магнитным полем, при вычислении которого учитываются спин-спиновые взаимодействия в подсистеме магнитных ионов. Поскольку величина G_e может достигать десятков, а G_h даже сотен мэВ, структура энергетических зон МСП, определяемая kp-гамильтонианом, дополненным $\mathcal{H}_e$, претерпевает качественные изменения в сравнительно слабых магнитных полях. Данные эффекты широко обсуждались в литературе [1-4], в частности, в связи с анализом спектров экситонных переходов, энергии которых описываются в общем случае выражением

$$E^{ex}_{n,p} = E^{ex}_0 + E^e_n - E^h_p - (R^{ex}_{n,p} - R^{ex}_0), \tag{2}$$

где E^{ex}_0 и R^{ex}_0 — энергии соответствующего экситонного перехода и диссоциации экситона при $H=0$, E^e_n, E^h_p — сдвиги краев электронных и дырочных спиновых подзон (n и p — их номера), вызванные как зеемановским расщеплением с зонным g-фактором, так и вкладом обменного поля (1), $R^{ex}_{n,p}$ — энергия диссоциации экситона в магнитном поле **H** (диамагнитными эффектами при определении $E^{ex}_{n,p}$ как правило можно пренебречь [4]).

Заметим, однако, что при анализе экситонных спектров в МСП, согласно выражению (2), зависимости $R^{ex}_{n,p}$ от магнитного поля и номеров спиновых подзон не учитывались, несмотря на существенные различия дисперсионных кривых в различных дырочных подзонах, отмеченные еще в [5]. При этом наблюдаемые расщепления между спиновыми компонентами экситонных спектров были отнесены только на счет сдвигов экстремумов E^e_n и E^h_p соответствующих подзон. Правомочность такого подхода обсуждалась в [3, 6], где для случая кубического МСП была отмечена независимость инерционной эффективной массы дырок $\bar{m}_h$, определяющей основной вклад дырок в приведенную эффективную массу экситона $\bar{\mu}$, от p и $\mathbf{H}$. В настоящей работе мы обращаем внимание на то, что в гексагональных МСП типа $Cd_{1-x}Mn_xS$ появляются зависимости $\bar{m}_h$ от p и $\mathbf{H}$, способные привести к наблюдаемым отклонениям $R^{ex}_{n,p}$ от R^{ex}_0 в (2).

2. Для вычисления $R^{ex}_{n,p}$ мы ограничимся актуальным для эксперимента случаем $\mathbf{H} \parallel \mathbf{c}$, где $\mathbf{c}$ — ось 6-го порядка гексагонального МСП. Гамильтониан, описывающий валентные A-, B- и C-зоны, в этом случае имеет вид ($\mathbf{z} \parallel \mathbf{c}$) [7]

$$\begin{aligned}\mathscr{H} = G_zS_z + \Delta_1L_z^2 + 2\Delta_2L_zS_z + \Delta_3(L_+S_- + L_-S_+) + (A_1 + A_3L_z^2)k_z^2 + \\ + (A_2 + A_4L_z^2)(k_x^2 + k_y^2) + \ldots,\end{aligned} \tag{3}$$

где первый член описывает вклад обменного поля (1), индекс дырочной зоны для простоты опущен, Δ_1, Δ_2, Δ_3 — константы кристаллического поля и анизотропного спин-орбитального взаимодействия, A_1, A_2, ... — зонные параметры гексагонального полупроводника, $\mathbf{L}$ — оператор углового момента дырки ($L=1$), $V_\pm = V_x \pm iV_y$ для произвольного вектора $\mathbf{V}$. В (3) не выписаны явно несущественные для дальнейшего слагаемые, обращающиеся в нуль при $k=0$. В Г-точке ($k=0$), отвечающей экстремумам электронной и дырочной зон, собственными векторами гамильтониана (3) являются следующие линейные комбинации собственных функций $|+\rangle$, $|-\rangle$ оператора S_z и $|1\rangle = (x+iY)/\sqrt{2}$, $|0\rangle = -Z$, $|-1\rangle = -(x-iY)/\sqrt{2}$ оператора L_z (X, Y, Z — волновые функции валентного электрона) [8, 9]:

$$\begin{aligned}|A^\pm\rangle &= |\pm1\rangle|\pm\rangle; \\ |B^\pm\rangle &= \sqrt{(1+\xi_\pm)/2}\,|\pm1\rangle|\mp\rangle + \sqrt{(1-\xi_\pm)/2}\,|0\rangle|\pm\rangle; \\ |C^\pm\rangle &= \pm\sqrt{(1-\xi_\pm)/2}\,|\pm1\rangle|\mp\rangle \mp \sqrt{(1+\xi_\pm)/2}\,|0\rangle|\pm\rangle,\end{aligned} \tag{4}$$

где

$$\xi_\pm = (\Delta_1 - \Delta_2 \mp G_z)\Big/\sqrt{(\Delta_1 - \Delta_2 \mp G_z)^2 + 8\Delta_3^2}. \tag{5}$$

Формулы (3)—(5) однозначно определяют энергии всех шести спиновых подзон, а также соответствующие им тензоры обратных эффективных масс. Симметрии рассматриваемой задачи отвечают две независимые компоненты: $(1/m)_{zz} = m_\parallel^{-1}$ и $(1/m)_{xx} = m_\perp^{-1}$, выражения для которых при условии пренебрежения в (3) малыми линейными по $\mathbf{k}$ слагаемыми принимают вид

$$\begin{aligned}\frac{1}{m^p_\parallel} &= \frac{1}{\hbar^2}\langle p|\frac{\partial^2\mathscr{H}}{\partial k_z^2}|p\rangle = \frac{2}{\hbar^2}[A_1 + A_3L_p(G_z)]; \\ \frac{1}{m^p_\parallel} &= \frac{1}{\hbar^2}\langle p|\frac{\partial^2\mathscr{H}}{\partial k_x^2}|p\rangle = \frac{2}{\hbar^2}[A_2 + A_4L_p(G_z)].\end{aligned} \tag{6}$$

Индекс p отвечает любому из состояний в (4), а матричные элементы $L_p(G_z) = \langle p|L_z^2|p\rangle$, вычисленные на функциях (4), приведены в таблице; их зависимость от G_z определяется формулами (5). Таким образом, благодаря влиянию эффективного обменного поля (1) на смешивание состояний отщепленной C-зоны с B-зоной гексагонального МСП магнитное поле может изменить эффективные массы в этих подзонах, причем для различных спиновых состояний по-разному.

$$I_p(C) = \langle p \mid I_z^2 \mid p \rangle$$

p	A^+	A^-	B^+	B^-	C^+	C^-
$I_p(G)$	1	1	$(1+\xi_+)/2$	$(1+\xi_-)/2$	$(1-\xi_+)/2$	$(1-\xi_-)/2$

В какой мере данный эффект проявится в ГСР экситонных спектров из-за влияния на $R^{ex}_{n,\,p}$ в (2), можно определить, если воспользоваться, например, результатами вариационного расчета энергии R^{ex} кулоновского центра в аксиально анизотропном кристалле [7]. Роль эффективных масс при этом играют приведенные массы экситона

$$\mu_\parallel = \frac{m^h_\parallel m^e}{m^h_\parallel + m^e}, \quad \mu_\perp = \frac{m^h_\perp m^e}{m^h_\perp + m^e}, \tag{7}$$

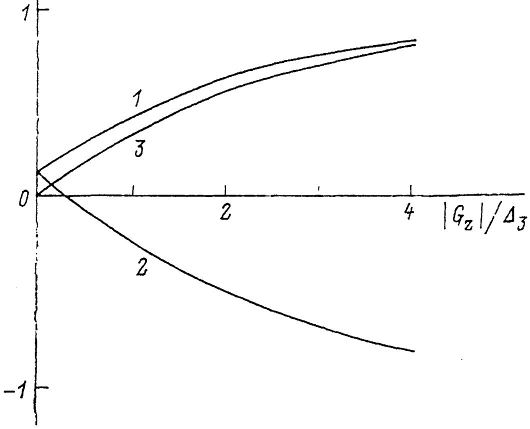
различие которых мало́ вследствие изотропного закона дисперсии в зоне проводимости (здесь мы используем эмпирически установленный факт $m^e_\perp = m^e_\parallel = m^e$ для гексагональных $A^{II}B^{VI}$) и сравнительно малой массы электрона. Последнее обстоятельство при вычислении $R^{ex} = R^{ex}(\gamma)$, $\gamma = \mu_\perp/\mu_\parallel$ позволяет воспользоваться разложением по малому параметру $1-\gamma$, в котором отсутствует линейный по этому параметру член, если в качестве нулевого приближения выбрать

$$\bar{R}^{ex} = \frac{\bar{\mu} e^4}{2\varkappa^2 \hbar^2}, \quad \frac{1}{\bar{\mu}} = \frac{1}{3\mu_\parallel} + \frac{2}{3\mu_\perp} = \frac{1}{m^e} + \frac{1}{3m^h_\parallel} + \frac{2}{3m^h_\perp}, \tag{8}$$

где $\bar{\mu}$ — инерционная приведенная масса экситона, определяемая в общем случае как $\bar{\mu} = 3/\mathrm{Sp}\,(\hat{\mu}^{-1})$ ($\hat{\mu}^{-1}$ — соответствующий тензор). В результате вычислений находим

$$R^{ex}(\gamma) = \bar{R}^{ex}\left[1 + \frac{5}{63}(1-\gamma)^2 + \dots\right], \tag{9}$$

где члены высших порядков по $(1-\gamma)$ для практически всех возможных ситуаций в $A^{II}B^{VI}$ вносят сравнительно малый вклад в $R^{ex}(\gamma)$. Таким образом, выражение (8) решает поставленную задачу, если для эффективных масс дырок воспользоваться значениями (6). Подставляя (6) в (8), окончательно находим



Магнитополевые зависимости факторов ξ_+ (*1*); ξ_- (*2*) и $\frac{1}{2}(\xi_+ - \xi_-)$ (*3*), полученные с учетом зонных параметров CdS.

зависимость $\bar{\mu}$ от величины обменного поля, определяющую данную зависимость для энергии ионизации экситонов $R^{ex}_{n,\,p}$ в (2):

$$m_0/\bar{\mu} = m_0/m^e + a_0 + a' L_p(G_z), \tag{10}$$

где введены безразмерные параметры (m_0 — масса свободного электрона):

$$a_0 = \frac{1}{3}a_1 + \frac{2}{3}a_2; \quad a' = \frac{1}{3}a_3 + \frac{2}{3}a_4; \quad a_i = \frac{2m_0 A_i}{\hbar^2}, \quad i = 1,\ 2,\ 3,\ 4. \tag{11}$$

Заметим, что случаю кубического полупроводника отвечают соотношения [7] $A_3 = -2A_4 = A_2 - A_1$, откуда следует, что в кубических МСП нельзя ожидать сколько-нибудь заметного изменения $R^{ex}_{n,\,p}$ с ростом G_z, так как для этих кристаллов $a' = 0$. Таким образом, влияние на энергию диссоциации экситонов проявляется лишь в меру отклонения соотношений между зонными параметрами от диктуемых кубической симметрией. По этой причине и для гексагональных МСП типа $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ рассматриваемый эффект ожидается не очень сильным. Математически это выражается в том, что последний член в (10) является малым по сравнению с суммой первых двух, а влияние поля (1) на энергию экситона описывается простым выражением

$$R^{ex} = R^{ex}_0 \left\{1 - \frac{\mu_0}{m_0} a' \left[L_p(G_z) - L_p(0)\right]\right\}, \tag{12}$$

где $m_0/\mu_0 = m_0/m^e + a_0$.

Сдвиги энергий, обусловленные вторым слагаемым в (12), приведут, например, к изменениям ГСР $E^+_{B(C)} - E^-_{B(C)}$ B- и C-экситонов на величины $\Delta E_R(G_z)$ и $-\Delta E_R(G_z)$ соответственно, где

$$\Delta E_R(G_z) = R^{ex}_0 \frac{\mu_0}{m_0} a' (\xi_+ - \xi_-)/2. \tag{13}$$

Таким образом, рассматриваемый эффект может приводить как к усилению, так и ослаблению ГСР B- и C-экситонных переходов в зависимости от того, совпадают либо различаются знаки разностей $E^+_{B(C)} - E^-_{B(C)}$ и $\xi_+ - \xi_-$.

3. В качестве иллюстрации эффекта рассмотрим сдвиги ГСР (13) для гексагонального МСП $Cd_{1-x}Mn_xS$. При этом мы будем пользоваться зонными параметрами CdS: $\Delta_1 = 28.4$; $\Delta_2 = 20.9$; $\Delta_3 = 20.7$ МэВ [8], $a_1 = 4.04$; $a_2 = 0.36$; $a_3 = -3.71$; $a_4 = 2.02$, которым соответствуют энергии экстремумов дырочных зон $E^0_A = 49.3$; $E^0_B = 33.3$; $E^0_C = -25.8$ мэВ и эффективные массы $m^e = 0.205$; а также $m^h_\parallel = 3.03$; 0.51 и $m^h_\perp = 0.42$; 0.67 (в единицах m_0) для A- и B-зон соответственно при $\mathbf{H} = 0$. Данным значениям отвечают $a' = 0.11$ и $a_0 = 1.59$, $\mu_0/m_0 = 0.155$. Вычисленные зависимости факторов $^1/_2\,(\xi_+ - \xi_-)$, ξ_+ и ξ_- от $|G_z|/\Delta_3$ приведены на рисунке, при этом мы учли знак $G_z < 0$, отвечающий в (1) $J_h < 0$ для всех известных МСП $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$. С учетом того, что $R^{ex}_0 \approx 29$ мэВ, видно, что предсказываемый теорией сдвиг ГСР (13) составляет для $Cd_{1-x}Mn_xS$ 0.3—0.4 мэВ при условии $|G_z| \geqslant \Delta_3$, реализуемом при не слишком больших концентрациях магнитной компоненты.

Так, в эксперименте [8], проведенном для этого МСП при $X = 1.3$ %, величина $|G_z|/\Delta_3$ достигала 3.2, в то время как наблюдаемое расщепление π-компонент B-экситона $\Delta E^\pi \cong 2.5$ мэВ. Вклад рассмотренного эффекта в это расщепление, как видно из проведенных оценок, составляет 15 %, и поэтому его следует учитывать наряду с ГСР энергетических зон МСП.

В заключение отметим, что компоненты тензора эффективных масс дырочных B- и C-зон в обменном поле (1), согласно формулам (6), изменяются сравнительно сильнее, чем R^{ex}, что может потребовать учета данного обстоятельства при анализе диффузии экситонов либо эффектов пространственной дисперсии светоэкситонов.

Список литературы

[1] Комаров А. В., Рябченко С. М., Терлецкий О. В., Жеру И. И., Иванчук Р. Д. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. В. 8. С. 608—618.
[2] Calazka R. R. // Lect. Notes Phys. 1982. V. 152. N 2. P. 294—301.
[3] Рябченко С. М., Семенов Ю. Г. // Спектроскопия кристаллов. Л., 1983. С. 206—225.
[4] Рябченко С. М. // Изв. АН СССР. Сер. Физика. 1982. Т. 46. В. 3. С. 440—445.
[5] Gai J. A., Cinter J., Galazka R. R. // Phys. St. Sol. (b). 1978. V. 89. N 2. P. 655—662.
[6] Семенов Ю. Г. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 11. С. 2047—2051.
[7] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
[8] Nawrocki M., Lascaray J. P., Coquillat D., Demianiuk M. // MRS Symp. proc. / Ed. by R. L. Aggarwal, J. K. Furdyna, S. von Molnar. 1987. V. 89. N 1. P. 65—70.
[9] Gubarev S. I. // Phys. St. Sol. (b). 1986. V. 134. N 1. P. 211—222.

Институт полупроводников
АН Украины
Киев

Получена 17.06.1991
Принята к печати 21.08.1991