Магнитный момент акцепторного центра в кубических полупроводниках

© А.В. Малышев, И.А. Меркулов

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 19 июля 1996 г.)

Для алмазоподобных полупроводников рассчитано расщепление в магнитном поле спиновых уровней основного состояния акцепторного центра, описываемого суперпозицией кулоновского потенциала и потенциала центральной ячейки. Получено аналитическое выражение для g-фактора в модели потенциала нулевого радиуса, зависящее только от соотношения масс легкой и тяжелой дырок. Показано, что отличия в значениях g-фактора для предельных случаев чисто кулоновского потенциала и потенциала нулевого радиуса не превосходят 5%, что позволяет использовать для оценок найденную аналитическую формулу.

Во внешнем магнитном поле локализованные состояния носителей заряда, вырожденные по проекции углового момента, расщепляются (эффект Зеемана).

Из-за сложности структуры валентной зоны в алмазоподобных полупроводниках значение g-фактора локализованной на акцепторе дырки обычно рассчитывают вариационным методом. В этой работе такой расчет будет выполнен для кристаллов CaAs на основе найденных в [1] волновых функций основного состояния акцепторов с различной энергией связи (различной величиной химического сдвига).

Как хорошо известно, состояние свободной дырки в четырехкратно вырожденной валентной зоне в алмазоподобном полупроводнике в присутствии внешнего постоянного магнитного поля описывается гамильтонианом Латтинжера [2]

$$\hat{H}_L(\mathbf{H})=\frac{\hbar^2}{m}\Big\{\Big(\gamma_1+\frac{5}{2}\gamma_2\Big)\frac{\hat{k}^2}{2}-\gamma_2\Big(\hat{k}_x^2\hat{J}_x^2+\hat{k}_y^2\hat{J}_y^2+\hat{k}_z^2\hat{J}_z^2\Big)$$
$$-2\gamma_3\Big(\{\hat{k}_x,\hat{k}_y\}\{\hat{J}_x,\hat{J}_y\}+\{\hat{k}_y,\hat{k}_z\}\{\hat{J}_y,\hat{J}_z\}+\{\hat{k}_z,\hat{k}_x\}$$
$$\times\{\hat{J}_z,\hat{J}_x\}\Big)+\varkappa\frac{e}{\hbar c}\hat{\mathbf{J}}\mathbf{H}+q\frac{e}{\hbar c}\Big(\hat{J}_x^3H_x+\hat{J}_y^3H_y+\hat{J}_z^3H_z\Big)\Big\}, \quad (1)$$

где $\gamma_1,\gamma_2,\gamma_3,\varkappa$ и q — параметры Латтинжера, $\hat{k}_\alpha=\hat{p}_\alpha+(e/c)A_\alpha=-i(\partial/\partial x_\alpha)+(e/c)A_\alpha$, $\mathbf{A}=(1/2)[\mathbf{H}\times\mathbf{r}]$ — вектор-потенциал магнитного поля $\mathbf{H}$. Мы будем рассматривать наиболее простой случай, когда магнитное поле направлено вдоль оси z, т.е. $\mathbf{H}=(0,0,H)$.

Для того чтобы рассчитать g-фактор акцепторного центра, необходимо знать волновые функции дырки, связанной на этом центре. Гамильтониан дырки, связанной на акцепторе в алмазоподобном полупроводнике, отличается от (1) наличием потенциала притяжения $V(\mathbf{r})$, который, вообще говоря, различен для разных акцепторов. Этот потенциал обычно представляется в виде суперпозиции дальнодействующего кулоновского потенциала и короткодействующего потенциала центральной ячейки, который заменяется на потенциал нулевого радиуса. Метод расчета волновых функций акцептора для такой общей задачи был развит в [1]. Для наших расчетов мы воспользуемся найденными в [1] волновыми функциями основного состояния акцептора.

Гамильтониан дырки, связанной на акцепторе, представим в виде суммы $\hat{H}=\hat{H}_L^{(0)}+\hat{H}'$. Здесь $\hat{H}^{(0)}=\hat{H}_L(0)+V(\mathbf{r})$ — гамильтониан связанной дырки без магнитного поля, $\hat{H}'$ — часть гамильтониана (1), содержащая магнитное поле. В отсутствие магнитного поля основное состояние акцепторного центра четырехкратно вырождено (полный угловой момент $F=3/2$). В слабом магнитном поле это вырождение снимается (эффект Зеемана) [3]

$$\Delta E_F=E_F-E_{-F}=-2\mu_{\mathrm{B}}g_FFH, \quad (2)$$

где $\mu_{\mathrm{B}}=e\hbar/(2mc)$ — магнетон Бора, m — масса свободного электрона, c — скорость света, g_F — g-фактор, H — магнитное поле. Таким образом, для расчета величины g-фактора достаточно определить величину расщепления магнитных подуровней с максимальным модулем проекции полного момента F на магнитное поле.

Воспользуемся полученными в [1] волновыми функциями акцепторного центра для нахождения поправки к энергии в первом по H порядке теории возмущений. В случае слабых полей квадратичными по полю членами можно пренебречь, тогда возмущение можно записать следующим образом:

$$\hat{H}'=\frac{e\hbar}{2mc}H\Big\{\Big(\gamma_1+\frac{5}{2}\gamma_2\Big)\hat{L}_z-2\gamma_2\Big(\hat{x}\hat{p}_y\hat{J}_y^2-\hat{y}\hat{p}_x\hat{J}_x^2\Big)$$
$$-2\gamma_3\Big[\Big(\{\hat{x},\hat{p}_x\}-\{\hat{y},\hat{p}_y\}\Big)\{\hat{J}_x,\hat{J}_y\}+\{\hat{x},\hat{p}_z\}\{\hat{J}_y,\hat{J}_z\}$$
$$-\{\hat{y},\hat{p}_z\}\{\hat{J}_z,\hat{J}_x\}\Big]+2\varkappa\hat{J}_z+2q\hat{J}_z^3\Big\}. \quad (3)$$

Далее будем рассматривать наиболее простой случай, в котором гамильтониан сферически-симметричен, т.е. $\gamma_3\equiv\gamma_2\equiv\gamma$, $q\equiv0$. При этом значение параметра γ определяется через параметры γ_2 и γ_3, взятые для кубически симметричного случая: $\gamma=(2\gamma_2+3\gamma_3)/5$. Тогда возмущение (3) можно переписать в более простом и удобном для расчетов виде

$$\hat{H}' = -\mu_{\mathrm{B}} H \Big\{ \Big[\Big(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma\Big) - \gamma(\hat{J}^2 - \hat{J}_z^2) \Big] \hat{L}_z + i\frac{\gamma}{2}\Big(\hat{r}_-\hat{p}_-\hat{J}_+^2 - \hat{r}_+\hat{p}_+^2\hat{J}_-^2\Big) + i\gamma\Big(\hat{p}_z\hat{r}_-\{\hat{J}_z, \hat{J}_+\} - \hat{p}_z\hat{r}_+\{\hat{J}_z, \hat{J}_-\}\Big) + 2\varkappa\hat{J}_z \Big\}. \qquad (4)$$

Для определения магнитного момента акцептора необходимо рассчитать матричный элемент $\langle\Psi_{3/2}|\hat{H}'|\Psi_{3/2}\rangle$, где угловыми скобками обозначается интегрирование по всем волновым векторам. В [1] было показано, что волновую функцию основного состояния акцептора в импульсном представлении можно искать в виде

$$\Psi_M(\mathbf{k}) = \Big[\hat{\Lambda}_h(\mathbf{k}) f_h(\mathbf{k}) + \hat{\Lambda}_l(\mathbf{k}) f_l(\mathbf{k})\Big] u_M, \quad M = \pm 1/2, \pm 3/2, \qquad (5)$$

где $\hat{\Lambda}_{h,l}(\mathbf{k})$ — операторы проектирования на состояния тяжелых и легких дырок [4], $f_{h,l}(\mathbf{k})$ — функции распределения дырки, связанной на акцепторе, по состояниям свободных дырок в валентных подзонах и по импульсам, а u_M — базисная функция вершины валентной зоны.

Нас интересует случай, в котором проекция полного момента дырки на акцепторе равна $M = 3/2$

$$\hat{\Psi}_{3/2}(\mathbf{k}) = [f_h(k) + f_l(k)]u_{3/2} + \frac{f_h(k) - f_l(k)}{2k^2} \times \Big[(k^2 - 3k_z^2)u_{3/2} - 2\sqrt{3}k_z(k_x + ik_y)u_{1/2} - \sqrt{3}(k_x + ik_y)^2 u_{-1/2}\Big] = 2\sqrt{\pi}Y_{0,0}u_{3/2}[f_h(k) + f_l(k)] + \sqrt{\frac{8\pi}{5}}\Big[\frac{Y_{2,0}}{\sqrt{2}}u_{3/2} - Y_{2,1}u_{1/2} + Y_{2,2}u_{-1/2}\Big][f_n(k) - f_l(k)]. \qquad (6)$$

Выражения для функций $f_{h,l}(k)$ зависят от используемой модели и в общем случае требуют численного расчета.

Используя выражение для общего вида волновой функции акцептора (6), можно записать поправку к энергии в более простом виде

$$\Delta E_J = 2\langle\Psi_{3/2}|\hat{H}'|\Psi_{3/2}\rangle = -2\mu_{\mathrm{B}} H \Big\{(\gamma_1 - \gamma)F_z + \gamma N + (2\varkappa - \gamma_1 + \gamma)J_z\Big\}, \qquad (7)$$

где $F_z = 3/2$ — значение проекции полного момента на магнитное поле,

$$J_z = \frac{9}{10} + \frac{12\pi}{5}\langle f_h(k) f_l(k)\rangle \qquad (8)$$

— среднее значение проекции спина 3/2 на поле (здесь и далее угловыми скобками обозначается интегрирование по модулю волнового вектора $\langle f(k)\rangle = \int\limits_0^\infty f(k)k^2dk$),

$$N = -\frac{12}{5} + \frac{12\pi}{5}\Big(3\langle f_l^2(k)\rangle - 2\langle f_h(k)f_l(k)\rangle - 2\langle f_l(k)kf_h'(k)\rangle\Big) \qquad (9)$$

— среднее значение недиагональной (в представлении $|L, L_z, J, J_z\rangle$) части оператора спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{N} = (i/2)\Big(\hat{r}_-\hat{p}_-\hat{J}_+^2 - \hat{r}_+\hat{p}_+^2\hat{J}_-^2\Big) + i\Big(\hat{p}_z\hat{r}_-\{\hat{J}_z, \hat{J}_+\} - \hat{p}_z\hat{r}_+\{\hat{J}_z, \hat{J}_-\}\Big), \qquad (10)$$

а штрих у функции $f_h(k)$ обозначает производную по модулю волнового вектора.

Расчет g-фактора конкретного акцептора требует численного расчета функций $f_{h,l}(k)$ для данной энергии связи (типа примеси) и типа полупроводника, а также расчета средних величин (8) и (9). Зависимость g-фактора от энергии связи акцептора для параметров Латтинжера $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9$, $\varkappa = 1.2$ [5] приведена на рис. 1 сплошной линией. Кружками показаны g-факторы наиболее часто используемых акцепторов [6]: C (27 meV), Be, Mg (28 meV), Zn (31 meV), Si (35 meV), Ge (40 meV), Mn (113 meV). Видно, что g-фактор слабо зависит от энергии связи, а именно изменение его величины от случая чисто кулоновского акцептора (26.4 meV) до случая глубокого примесного центра, описываемого одним потенциалом нулевого радиуса (штриховая линия), составляет около 5%.

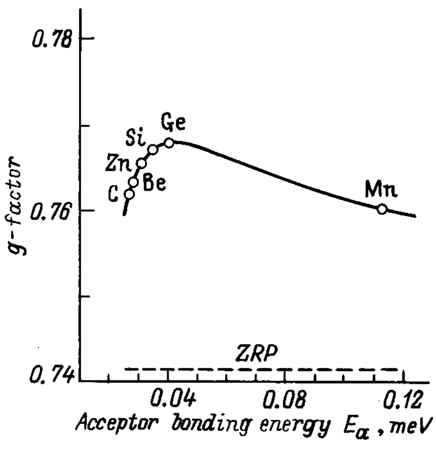

Рис. 1. Зависимость g-фактора от энергии связи акцептора E_a для параметров Латтинжера $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9$, $\varkappa = 1.2$ [5] (сплошная линия). Кружками показаны теоретические значения g-факторов наиболее часто используемых акцепторов: C (27 meV), Be, Mg (28 meV), Zn (31 meV), Si (35 meV), Ge (40 meV), Mn (113 meV). Штриховая линия — g-фактор глубокого примесного центра, описываемого одним потенциалом нулевого радиуса (ZRP).

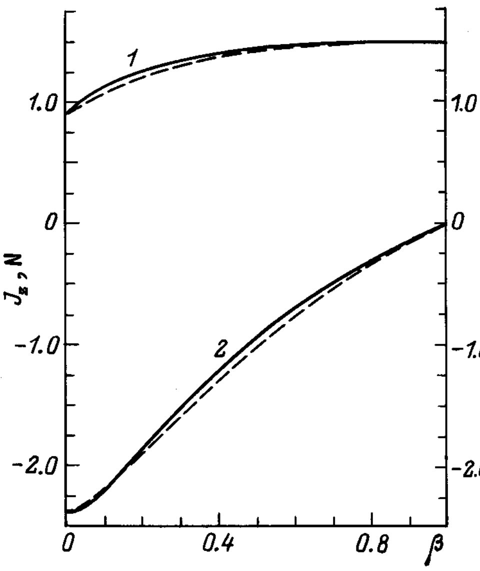

Рис. 2. Средние значения J_z (*1*) и N (*2*) для двух предельных случаев кулоновского акцептора (сплошные линии) и акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса (штриховые линии), в зависимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок.

В последнем случае волновая функция акцепторного состояния описывается простыми аналитическими выражениями [7]

$$f_h(k) = \frac{A}{k^2+\varepsilon}, \qquad f_l(k) = \frac{A\beta}{k^2+\beta\varepsilon},$$

$$A = \frac{\varepsilon^{1/4}}{\pi}\sqrt{\frac{2}{1+\beta\sqrt{\beta}}}, \quad \beta = \frac{m_l}{m_h}, \quad \varepsilon = \frac{E_a}{E_B}, \tag{11}$$

где m_l и m_h — эффективные массы легкой и тяжелой дырок, E_a — энергия связи акцептора, а E_B — боровская энергия тяжелой дырки. Из выражений (11) следует независимость величины g-фактора в модели потенциала нулевого радиуса от энергии связи акцептора. В этой модели интегралы, входящие в определения средних величин (8) и (9), можно взять аналитически

$$\langle f_h(k) f_l(k)\rangle = \frac{1}{\pi}\frac{\beta}{(1+\beta\sqrt{\beta})}\frac{1}{(1+\sqrt{\beta})},$$

$$\langle f_l^2(k)\rangle = \frac{1}{2\pi}\frac{\beta\sqrt{\beta}}{1+\beta\sqrt{\beta}},$$

$$\langle f_l(k) k f_h'(k)\rangle = -\frac{1}{\pi}\frac{\beta}{(1+\beta\sqrt{\beta})}\frac{1+2\sqrt{\beta}}{(1+\sqrt{\beta})^2}. \tag{12}$$

Подставляя (12) в (8), (9) и (2), получаем

$$g_F = \frac{2}{5}(5\gamma - \gamma_1 - 3\varkappa) + \frac{8}{5}\frac{\beta}{(1+\sqrt{\beta})(1+\beta\sqrt{\beta})} \times \left[\gamma_1 - 2\varkappa - \gamma\left(1 + \frac{(7+6\sqrt{\beta}+3\beta)\sqrt{\beta}}{2(1+\sqrt{\beta})}\right)\right]. \tag{13}$$

Как уже отмечалось выше, величины g-фактора в GaAs для чисто кулоновского акцептора и глубокого центра оказались практически одинаковыми. Аналогичный результат дают и расчеты для InSb, InP и GaP. Поэтому заманчиво воспользоваться формулой (13) для оценок величины g в различных полупроводниках с существенно разными значениями параметров Латтинжера. На рис. 2 сопоставлены результаты расчетов средних значений J_z и N для двух предельных случаев кулоновского акцептора (сплошные линии) и акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса (штриховые линии), во всем диапазоне значений отношения масс легкой и тяжелой дырок. Максимальные различия между этими моделями возникают при отношениях масс $\beta \approx 0.5$ и составляют порядка 10%. Однако в представляющей практический интерес области $\beta \leq 0.2$ ошибка не превосходит 5%. Таким образом, аналитическое выражение (13) для g-фактора акцептора, описываемого потенциалом нулевого радиуса, дает весьма точную оценку величины g-фактора кулоновского акцептора.

В заключение обратим внимание на то, что развитая выше теория становится несправедливой для достаточно глубоких центров, энергия связи которых сравнима с величиной саин-орбитального расщепления валентной зоны.

Авторы признательны А.В.Родиной, Д.Н.Мирлину и В.Ф.Сапеге за полезные обсуждения, Б.П.Захарчене за интерес к проведенным исследованиям.

Выполнение этой работы поддержано грантом РФФИ 95-02-040-55.

Список литературы

[1] А.В. Малышев, И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП **30**, *1*, 159 (1996).
[2] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
[3] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Квантовая вмеханика. Наука, М. (1989).
[4] И.А. Меркулов, А.В. Родина. ФТП **28**, *2*, 321 (1994).
[5] Q.X. Zhao et al. Phys. Rev. **B 49**, 10794 (1994).
[6] Landolt-Borstein. Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Springer Verlag (1982). V. 17. Subvol.a.
[7] В.И. Перель, И.Н. Яссиевич. ЖЭТФ **82**, 237 (1982).