

Акцепторный центр Mn_{Ga} в GaAs (Обзор)

© Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: Averkiev@les.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 16 апреля 2018 г.
В окончательной редакции 21 мая 2018 г.)

Описана модель акцептора Mn_{Ga} в GaAs, в которой Γ_8 исходное основное состояние связанной дырки изменяется из-за антиферромагнитного обменного взаимодействия с пятью $3d$ -электронами остова Mn. Рассмотрены энергетический спектр акцептора и волновые функции его состояний, а также их изменение под влиянием деформаций, электрических и магнитных полей. Приведены выражения для описания различных свойств изолированных акцепторов Mn_{Ga} в GaAs, и проанализированы данные ряда экспериментов (изменение спектров и поляризации люминесценции и поглощения Mn_{Ga}^0 при одноосных давлениях и в магнитном поле, спектры ЭПР, температурная зависимость магнитной восприимчивости, циркулярная поляризация фотолуминесценции при возбуждении поляризованным светом в магнитном поле и др.). Продемонстрировано, что в некоторых случаях необходимо учитывать существование в кристалле случайных электрических и деформационных полей, расщепляющих состояния акцептора. Результаты этого анализа показывают, что указанная модель хорошо согласуется с большинством экспериментальных результатов. Величина константы обменного взаимодействия лежит в диапазоне 3–5 meV.

Работа была частично поддержана проектом РФФ 14-42-00015 (выполнение теоретических расчетов и оценок) и Программой Президиума РАН № 9 „Терагерцовая оптоэлектроника и спинтроника“.

DOI: 10.21883/FTT.2018.12.46716.106

Содержание

1. Введение
2. Изменение положения и поляризации полосы излучения Mn_{Ga} при одноосном давлении
3. Влияние одноосного давления на спектры возбуждения нейтрального акцептора Mn_{Ga}
4. Магнитная восприимчивость нейтральных акцепторов Mn_{Ga}
5. Спектры рамановского рассеяния, связанные с нейтральными акцепторами Mn_{Ga}^0
6. Электронный парамагнитный резонанс, связанный с Mn_{Ga} в p -GaAs
7. Влияние магнитного поля на спектр возбуждения Mn_{Ga}^0
8. Циркулярная поляризация фотолуминесценции, вызванной рекомбинацией электрона с дыркой на центре Mn_{Ga} в магнитном поле
9. Поглощение ультразвука, связанное с центрами Mn_{Ga}^0
10. Эффект Холла в p -GaAs: Mn
11. Волновая функция исходного основного состояния дырки, локализованной на нейтральном акцепторе Mn_{Ga}^0
12. Заключение

Приложение 1. Волновые функции $|F, m_F\rangle$ состояний Mn_{Ga}^0 с $F = 1, 2, 3, 4$ и различными проекциями полного момента m_F в сферическом приближении

Приложение 2. Спектр и волновые функции основного состояния нейтрального центра Mn_{Ga}^0 с учетом случайных полей в кристалле

1. Введение

Исследования глубоких центров, создаваемых атомами переходных металлов в полупроводниках, ведутся уже на протяжении нескольких десятков лет (см., например, [1–3]). Помимо чисто научного интереса, связанного с пониманием влияния d -электронов на особенности свойств этих центров, такие исследования вызваны и некоторыми практическими задачами. В частности, среди таких задач можно назвать разработку методов получения полуизолирующего арсенида галлия, стимулировавшую изучение этих центров на ранних этапах исследования [1], и создание различных устройств спинтроники, вызывающее интерес к примесям переходных элементов в настоящее время [4,5].

В полупроводниках $A^{III}B^V$ атомы переходных элементов в основном замещают атомы A -подрешетки. При этом в соответствии с представлениями, развитыми в работах [6,7], электроны (1 или 2) $4s$ -оболочки переходных элементов и недостающая до 3 часть электронов $3d$ -оболочки идут на образование связей с четырьмя атомами B -подрешетки полупроводника. Таким образом, число электронов в d -оболочке уменьшается, то есть „дырка“ (или 2 „дырки“) локализуется в d -оболочке примесного атома. Эта модель была подтверждена рядом исследований для примесных центров, образованных атомами Fe, Cr, Ni в GaAs, Fe в GaP и InP (см., например, [1–3]).

Атом Mn со структурой двух внешних оболочек $3d^5 4s^2$ в решетке GaAs замещает атом Ga и создает акцепторный центр с наиболее мелким из всех переход-

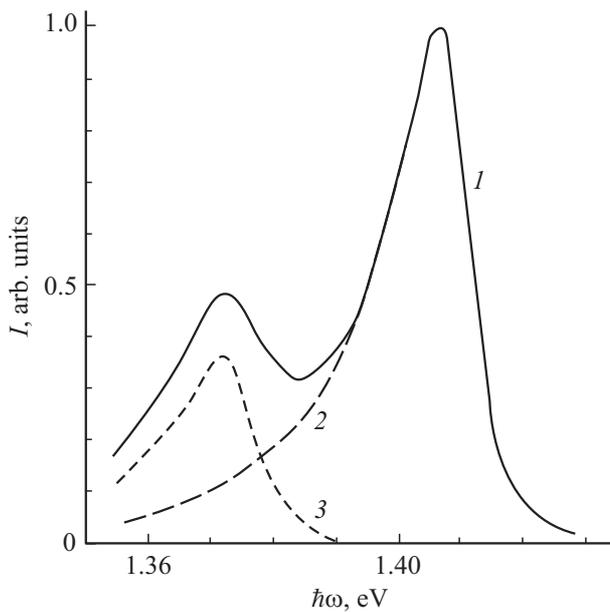


Рис. 1. Спектральное распределение интенсивности фотолюминесценции центра Mn_{Ga} в арсениде галлия при температуре 1.8 K [10]. 1 — спектр фотолюминесценции, 2, 3 — форма основного пика и его фононного повторения (энергия фона ~ 35 meV).

ных металлов в GaAs уровнем энергии. Этот уровень лежит на ~ 0.11 eV выше потолка валентной зоны [8]. Излучательный захват электрона из зоны проводимости (или мелкого уровня вблизи нее) на этот уровень дает полосу фотолюминесценции с максимумом при энергии фотонов около 1.41 eV [8–11] (рис. 1).

Исследования методами нестационарной спектроскопии глубоких уровней (DLTS) показали, что энергия активации термической эмиссии дырок центром Mn_{Ga}^0 практически совпадает с глубиной залегания уровня акцептора, а сечение захвата дырок на Mn_{Ga}^- при увеличении температуры от 34.6 K до 43.7 K уменьшается от $1.63 \cdot 10^{-14}$ cm² до $0.38 \cdot 10^{-14}$ cm² [11]. Такое поведение сечения захвата может быть объяснено механизмами каскадного или двухступенчатого захватов [11]. Величины сечения захвата электронов центром Mn_{Ga}^0 , определенные при температуре 41 K как методом DLTS, так и по характеристическому времени спада интенсивности люминесценции центра, были близки и составляли примерно $1 \cdot 10^{-18}$ cm² [11].

В ранних работах [12,13] основное состояние нейтрального акцептора Mn_{Ga}^0 , считалось подобным состоянию акцепторов, вводимых другими переходными металлами, то есть предполагалось, что связанная дырка локализуется в d -оболочке Mn. Модели, основанные на этом предположении, использовались при объяснении температурной зависимости магнитной восприимчивости, обусловленной Mn_{Ga}^0 [12], и эффекта Фарадея в GaAs:Mn [13]. Однако прямых доказательств существования в GaAs состояний Mn_{Ga}^0 с уменьшенным числом электронов в d -оболочке получено не было, и впослед-

ствии было показано, что нейтральный акцептор Mn в арсениде галлия связывает одну обычную дырку, состояния которой видоизменяется благодаря обменному взаимодействию с пятью $3d$ -электронами остова Mn.

Эта модель, первоначально рассмотренная в работах [9,10,14,15] состоит в следующем. На внешней оболочке атома Mn находится 2 электрона, поэтому, замещая атом Ga, атом Mn, отдавший два электрона на валентные связи, как и обычные мелкие акцепторы, создаваемые элементами второй группы Zn и Cd, связывает одну дырку. Исходное состояние дырки, как и в случае мелких акцепторов и более глубоких двойных акцепторов, образуемых элементами первой группы Cu, Ag и Au, является Γ_8 -состоянием, то есть имеет полный момент $J = 3/2$. Эта дырка взаимодействует с пятью электронами $3d$ -оболочки Mn, исходное состояние которых, как и в свободном атоме Mn, характеризуется нулевым орбитальным моментом и полным спином $S_d = 5/2$. Необменная часть взаимодействия просто изменяет энергию связи дырки и в дальнейшем рассматриваться не будет. В предположении, что энергетическое расстояние между исходным основным и возбужденным состоянием дырки намного превышает величины энергий, характеризующих все возмущения состояния дырки, гамильтониан, описывающий обменную часть взаимодействия дырки и d -электронов, может быть представлен в виде

$$\hat{H}_{\text{exch}} = -A(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_d), \quad (1)$$

где A — константа обменного взаимодействия. В результате такого взаимодействия состояния d -электронов и дырки смешиваются так, что 24-кратно вырожденный основной уровень системы расщепляется на 4 подуровня, характеризуемых значениями полного момента $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{S}_d$, равными 1, 2, 3 и 4 [16]. Основным состоянием, как показывает анализ экспериментальных данных, является состояние с $F = 1$ ($A < 0$, то есть обменное взаимодействие антиферромагнитно). Энергии других состояний, отсчитываемые от основного, равны $E(F = 2) = -2A$, $E(F = 3) = -5A$, $E(F = 4) = -9A$.

Волновые функции состояний для каждого F классифицируются по проекциям полного момента m_F и могут быть составлены с помощью коэффициентов Клебша–Гордана. Они приведены в Приложении 1 и являются суперпозицией волновых функций дырки с проекцией момента $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$, смешанных обменным взаимодействием с $3d^5$ -электронами, характеризуемыми проекциями полного спина $S_d = 5/2$.

В реальных кристаллах GaAs, легированных Mn, часто существуют достаточно сильные случайные деформационные и электрические поля. При относительно высоких содержаниях Mn причины этого могут быть следующими. Во-первых, замещая Ga, атом Mn создает деформационное поле, так как постоянная решетки MnAs со структурой цинковой обманки больше, чем постоянная решетки GaAs (см., например, [17]). Во-вторых, вхождение атома Mn в междоузлие, что тоже имеет место, кроме локальных деформаций решетки,

приводит к появлению двойных доноров Mn , которые так же как остаточные доноры другой природы, компенсируют акцепторы и создают электрические поля [18]. Если случайные поля дают расщепление исходного Γ_8 состояния дырки, которое меньше абсолютной величины константы обменного взаимодействия, учет их влияния в рамках описанной модели возможен по теории возмущений [19,20]. Противоположный случай, когда расщепление в случайном поле сильно превышает обменное, которое учитывается по теории возмущений, рассматривался в работе [9].

Ниже будет описан ряд свойств центра Mn_{Ga} , вытекающих из приведенной модели, и проанализированы результаты экспериментального исследования этих свойств.

2. Изменение положения и поляризации полосы излучения Mn_{Ga} при одноосном давлении

Исследования поведения примесной фотолюминесценции при одноосном давлении позволяют получить информацию о пространственном строении и особенностях электронной структуры примесного центра. Подобные исследования глубокого центра Mn_{Ga} были проведены в работах [10,14,21].

В ранней работе [21] смещение и поляризация полосы фотолюминесценции Mn_{Ga} , измеренные при одноосных давлениях до 3–4 kbar, интерпретировались на основе модели, принятой для мелкого акцептора [22,23], то есть не учитывалось обменное взаимодействие дырки с $3d$ -электронами. Количественное сопоставление этой модели с данными эксперимента приводило к аномально низким абсолютным значениям констант деформационного потенциала ($b_T = -0.35 \pm 0.1$ eV; $d_T = -0.8 \pm 0.15$ eV) и слишком высоким коэффициентам, описывающих нелинейный сдвиг энергетического уровня центра при деформации [21]. Кроме того, хорошо описывая экспериментальные результаты при давлении до 3–4 kbar эта модель дает плохое согласие с экспериментальными данными, полученными при давлениях от 4 до 10 kbar [14].

В модели, учитывающей обменное взаимодействие дырки и d -электронов, описанной в разделе 1, можно положить, что деформация непосредственно оказывает воздействие только на дырку, радиус локализации которой сравнительно велик, и не изменяет исходного состояния d -электронов. Дырка же, посредством обменного взаимодействия перестраивает все состояние Mn_{Ga} в поле деформации. Тогда в условиях одноосной деформации гамильтониан в линейном по деформации приближении имеет вид

$$\hat{H} = -A(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_d) + a_T \text{Sp}(\varepsilon) + \left(J_{Z_i}^2 - \frac{5}{2} \right) f_i \varepsilon'_i, \quad (2)$$

где a_T и f_i — исходные (без учета обменного взаимодействия) константы деформационного потенциала центра, Z_i — ось внешней нагрузки ([111]

или [001]), ε'_i — относительная деформация вдоль оси Z_i , J_{Z_i} — оператор проекции момента $J = 3/2$ на ось Z_i . При сжатии под влиянием давления P вдоль оси [111] $f_i \varepsilon'_i = d_T \varepsilon_3 / \sqrt{3} = -d_T P / 2\sqrt{3} C_{44}$, при сжатии вдоль оси [001] $f_i \varepsilon'_i = b_T \varepsilon_1 = -b_T P / (C_{11} - C_{12})$, где C_{ij} — упругие постоянные кристалла. В выражении (2) опущен основной гамильтониан, определяющий энергию связи дырки в отсутствии внешней деформации и обменного взаимодействия.

Учет в гамильтониане (2) квадратичных по деформации поправок, которые возникают за счет смешивания исходных возбужденных состояний с основным, может быть произведен, если предположить, что эти поправки аналогичны поправкам для вершины валентной зоны $GaAs$, то есть

$$\hat{H} = -A(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_d) + a_T \text{Sp}(\varepsilon) - \frac{(f_i \varepsilon'_i)^2}{\Delta} + \left(J_{Z_i}^2 - \frac{5}{4} \right) f_i \varepsilon'_i \left(1 + \frac{f_i \varepsilon'_i}{\Delta} \right). \quad (3)$$

В отличие от выражения для валентной зоны в гамильтониане (3) параметр Δ не тождественен величине спин-орбитального расщепления, а представляет собой величину порядка энергетического расстояния между основным и возбужденным состоянием дырки в отсутствии обменного взаимодействия с d -электронами [14]. В выражении (3) предполагается, что $\Delta \gg |f_i \varepsilon'_i|, |A|$, и содержатся члены первого порядка по $f_i \varepsilon'_i / \Delta$ и нулевого порядка по A / Δ .

Спектр и волновые функции дырки при деформации вдоль оси [111] или [001] получаются путем диагонализации гамильтониана (3). Полностью результаты этой процедуры приведены в [14,20]. Качественная схема расщепления уровней дырки при одноосной деформации показана на рис. 2. Приведем аналитические выражения для положения первых трех уровней в случае давления вдоль оси [111] или [001]. Основной уровень с $F = 1$ расщепляется на 2 подуровня: невырожденный терм E_0 с проекцией полного момента на ось деформации $m_F = 0$ и двукратно вырожденный терм E_1 с $|m_F| = 1$. Расстояние этих подуровней от дна зоны проводимости определяется выражениями

$$E_0 = E'_0 + a_T \text{Sp}(\varepsilon) - \frac{(f_i \varepsilon'_i)^2}{\Delta} + \frac{5}{2} A \left(\sqrt{1 + 0.16(x^2 + x)} - 1 \right), \quad (4)$$

$$E_1 = E'_0 + a_T \text{Sp}(\varepsilon) - \frac{(f_i \varepsilon'_i)^2}{\Delta} + (\lambda + 4)|A|, \quad (5)$$

где E'_0 — расстояние уровня с $F = 1$ до дна зоны проводимости при нулевой деформации,

$$x = \frac{f_i \varepsilon'_i}{|A|} \left(1 + \frac{f_i \varepsilon'_i}{\Delta} \right), \quad (6)$$

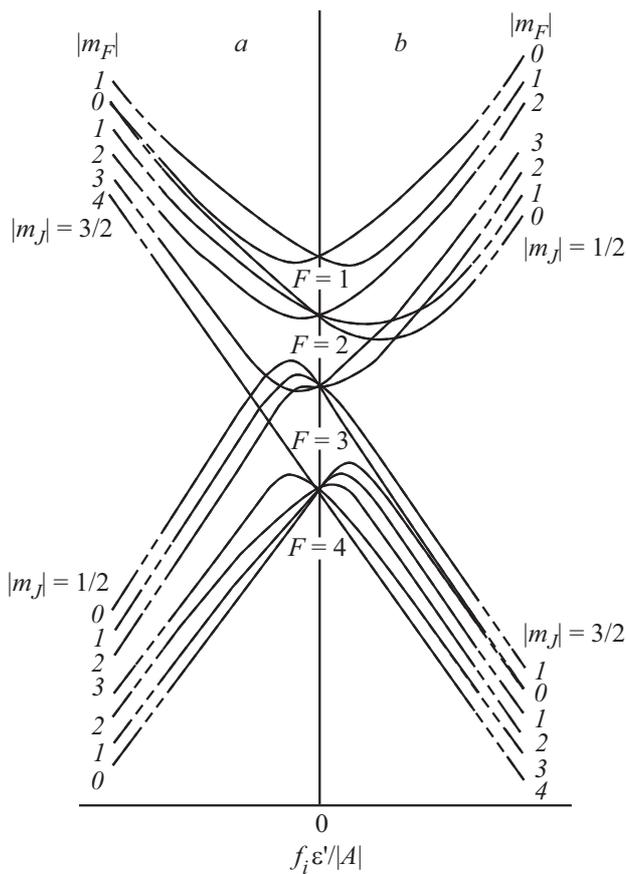


Рис. 2. Схема расщепления уровней акцептора Mn_{Ga}^0 при одноосном растяжении (a) и сжатии (b) [10]. F — полный момент дырки и d — электронов, m_F — проекция полного момента на ось деформации, m_J — проекция момента дырки на ось деформации при $f_i \epsilon'_i / |A| \rightarrow \infty$.

а λ — наименьший корень уравнения

$$\lambda^4 - \lambda^2(2x^2 - 4x + 23) + \lambda(12x - 18) + (x^4 - 4x^3 + 6x^2 - 7x + 40) = 0. \quad (7)$$

Энергия следующего за этими двумя уровнями отщепившегося подуровня терма с $F = 2$ связана с деформацией соотношением

$$E_2 = E'_0 + 2A + a_T \text{Sp}(\epsilon) - \frac{(f_i \epsilon'_i)^2}{\Delta} + \left(\kappa + \frac{16}{3} - \frac{x}{3} \right) |A|, \quad (8)$$

где κ — наименьший корень уравнения

$$\kappa^3 - \left(\frac{4}{3}x^2 + \frac{4}{3}x + \frac{37}{3} \right) \kappa - \left(\frac{16}{27}x^3 + \frac{8}{9}x^2 - \frac{32}{9}x + \frac{110}{27} \right) = 0. \quad (9)$$

Изменение относительного положения уровней E_0, E_1 и E_2 с давлением вдоль оси [111] или [001] показано

на рис. 3. Одновременно с этим происходит и изменение волновых функций каждого состояния, вызывающее изменение поляризации люминесценции, связанной с захватом электронов на эти уровни. Зависимости поляризационного отношения r этого излучения (то есть, отношение интенсивностей люминесценции с электрическим вектором параллельным и перпендикулярным оси давления) от величины одноосной деформации при сжатии представлены на рис. 4. В случае рекомбинации с дыркой на подуровне E_0 эта зависимость описывается простым аналитическим выражением

$$r_{lmn} = (10 + 2z)/(10 - z), \quad z = (1 + 2x)/\sqrt{1 + 0.16(x^2 + x)}. \quad (10)$$

Экспериментальные зависимости поляризационного отношения и смещения пика фотолюминесценции Mn_{Ga} от величины одноосного давления при температуре жидкого гелия [10,14,21] представлены на рис. 5. Погрешность экспериментальных данных, приведенная в работе [14], в основном объясняется неточностью установки образца и большей загрязненностью исследованных образцов, вызывающей флуктуации электрических полей и деформаций внутри кристалла и, следовательно, понижающих поляризационное отношение особенно при низких внешних давлениях и уширяющих полосу фотолюминесценции. Последнее увеличивает погрешность при определении положения пика в спектре излучения. Как следует из приведенных зависимостей, поляризационное отношение излучения при увеличении давления

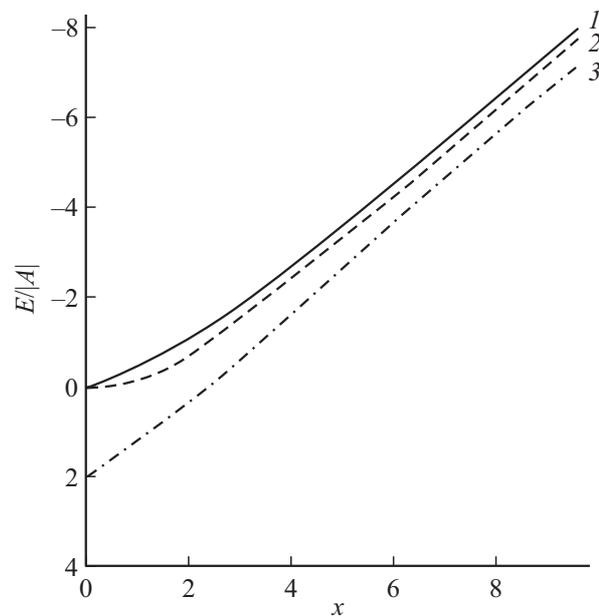


Рис. 3. Относительное положение первых трех уровней энергии дырки, связанной на центре Mn_{Ga} , $\left[E_i - a_T \text{Sp}(\epsilon) + \frac{(f_i \epsilon'_i)^2}{\Delta} \right] / |A|$ в зависимости от давления вдоль одной из главных осей кристалла [14]. Уровни: 1 — E_0 , 2 — E_1 , 3 — E_2 .

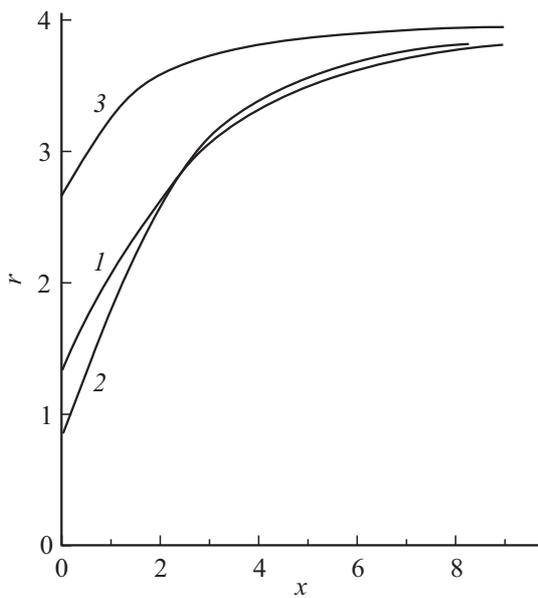


Рис. 4. Поляризационное отношение излучения при рекомбинации электронов из зоны проводимости с дырками, локализованными на уровнях E_0 (кривая 1), E_1 (кривая 2) и E_2 (кривая 3) [20].

начинает превышать 1 уже при малых давлениях. Согласно результатам вычислений (рис. 4) это означает, что в условиях одноосного сжатия терм E_0 является основным, как и показано на рис. 3, то есть константы деформационного потенциала f_i , как и для мелкого акцептора и вершины валентной зоны, отрицательны.

Основные качественные особенности представленных зависимостей по сравнению с пьезоспектроскопическим поведением излучения, связанного с межзонными переходами или захватом электронов на мелкий акцептор [22], состоят, во-первых, в быстром уменьшении скорости смещения положения максимума излучения с ростом давления и, во-вторых, в медленном увеличении поляризационного отношения с давлением. В рассматриваемой модели первая особенность объясняется быстрым увеличением с деформацией абсолютной величины связанного с обменным взаимодействием последнего члена в (4), который, поскольку $A < 0$, дает сверхлинейное уменьшение E_0 . Вторая особенность вызывается тем, что в отличие от мелких акцепторов возрастание поляризации излучения с давлением в широком диапазоне давлений в основном связано не с изменением равновесной заселенности дырками расщепившихся подуровней центра, а с изменением под влиянием де-

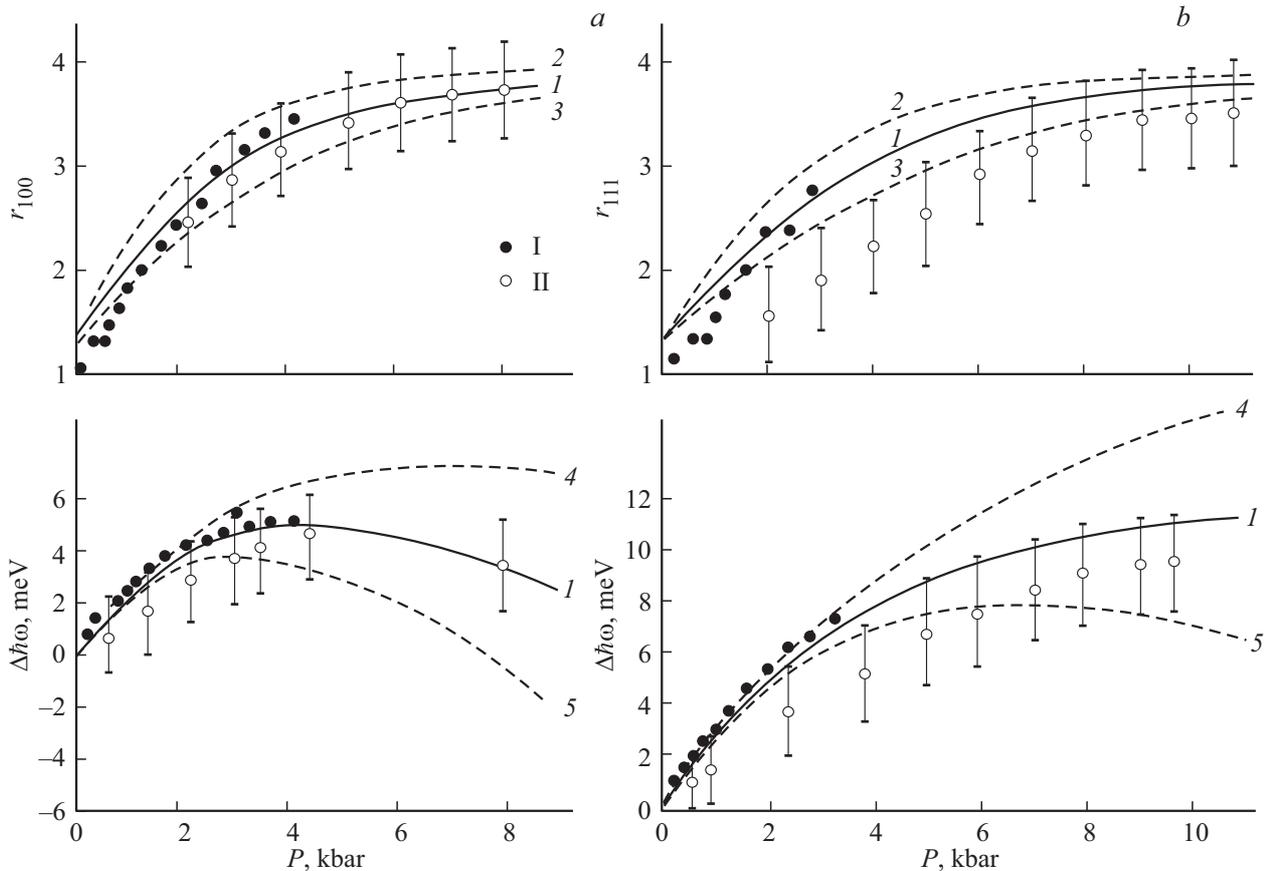


Рис. 5. Зависимости поляризационного (r) отношения и смещения максимума полосы фотолуминесценции Mn_{Ga} ($\Delta\hbar\omega$) от величины давления вдоль оси [001] (a) или [111] (b) [14]. Точки — эксперимент для полосы фотолуминесценции с максимумом при энергии фотонов 1.406 eV (I — [21], II — [10,14]). Линии — расчет при $a_T = -8.9$ eV, $\Delta = 330$ meV и разных значениях других параметров; A , meV: 1 — -4, 2, 4 — -3.5, 3, 5 — -4.5; b_T , eV: 1 — -2.35, 2, 5 — -2.8, 3, 4 — -1.9; d_T , eV: 1 — 5.9, 2, 5 — 6.5, 3, 4 — -4.9.

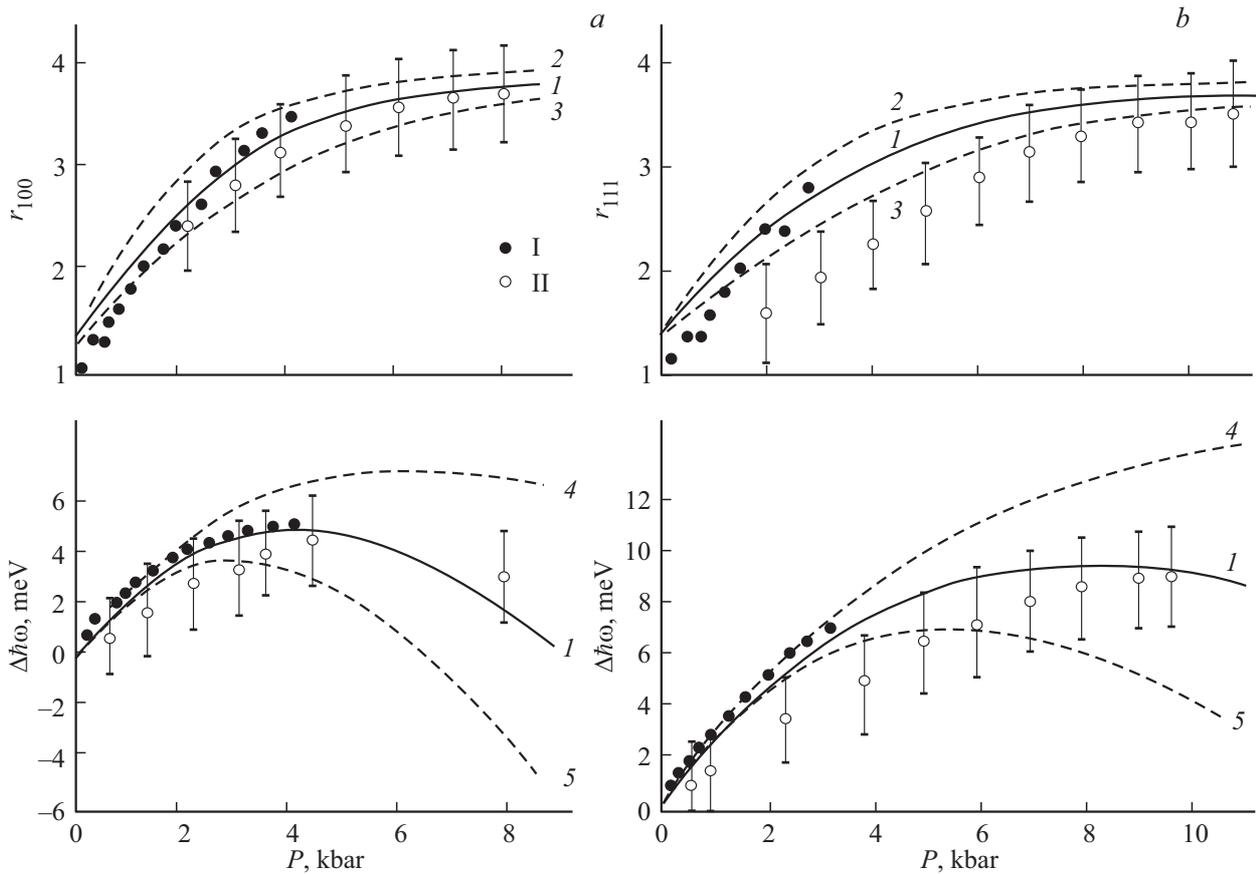


Рис. 6. Зависимости поляризационного отношения и смещения максимума полосы фотолюминесценции Mn_{Ga} от величины давления вдоль оси $[001]$ (a) или $[111]$ (b) [14]. Точки — эксперимент для полосы фотолюминесценции с максимумом при энергии фотонов 1.406 eV (I — $[21]$, II — $[10,14]$). Линии — расчет при $a_T = -8.9$ eV, $\Delta = 150$ meV и разных значениях других параметров; A, meV: 1 — -3.6 , 2, 4 — -3.1 , 3, 5 — -4.1 ; b_T , eV: 1 — -2.1 , 2, 5 — -2.5 , 3, 4 — -1.7 ; d_T , eV: 1 — 5.3 , 2, 5 — 6.2 , 3, 4 — -4.4 .

формации волновых функций дырочных состояний, что приводит к изменению поляризационного отношения излучения связанного с захватом электрона в каждое из этих состояний (рис. 4). Последнее обстоятельство связано с тем, что волновые функции расщепившихся под влиянием давления состояний представляют собой сложную суперпозицию волновых функций дырки с проекцией момента $\pm 1/2$ и $\pm 3/2$, смешанных обменным взаимодействием. При этом, как следует из рис. 4, поляризационное отношение для переходов на расщепившиеся подуровни E_0 и E_1 основного состояния остается меньше 4 при даже при значениях x , близких к 10.

Для количественного анализа экспериментальных данных [10,14,21] предполагалось, что поскольку энергия связи дырки на центре Mn_{Ga} близка к энергии связи мелкого акцептора, константа деформационного потенциала a_T совпадает с таковой для валентной зоны GaAs. Такое предположение следует для локализованных состояний, построенных из волновых функций v -зоны [24] и экспериментально подтверждено для мелкого акцептора [25]. Численное сопоставление расчетов с экспериментом проводилось при различных значениях Δ ,

а константы деформационного потенциала (b_T, d_T) и обменного взаимодействия (A) подбирались так, чтобы наилучшим образом описать четыре экспериментальные зависимости, а именно: изменения положения максимума низкотемпературной полосы излучения Mn_{Ga} ($\Delta\hbar\omega = E_0 - E'_0$) и ее поляризации (r_{lmn}) при одноосном давлении вдоль направления $[111]$ или $[001]$.

При этом в области низких давлений (до 4 kbar), где существование случайных полей может значительно изменить поляризацию и смещение пика люминесценции, для аппроксимации использовались результаты работы [21] в которой исследовались образцы с малыми случайными полями и деформациями и вследствие этого измеренные величины поляризации и смещения были максимальными. Результаты работ [10,14], в которых исследовались образцы с более высокими случайными расщеплениями основного состояния учитывались при аппроксимации только в области высоких давлений (около 10 kbar), где случайные расщепления заметно ниже вызванных внешним давлением и потому оказывают меньшее влияние. Это позволяло избежать или минимизировать влияние случайных расщеплений на результаты аппроксимации.

Поскольку поляризационное отношение излучения даже при давлении 10 kbar не достигает 4, можно полагать, что константа обменного взаимодействия достаточно велика и при гелиевых температурах дырками заселено только основное состояние $F=1$, которое при одноосном давлении расщепляется на два подуровня E_0 и E_1 . Как показывают вычисления (рис. 4), при значениях поляризационного отношения выше 2 излучательная рекомбинация электронов с дырками на каждом из этих подуровней дает приблизительно одинаковую величину поляризации. Поэтому при аппроксимации экспериментальной зависимости $r_{lmn}(P)$ в [14] использовалось выражение (10). При $r_{lmn} < 2$ это выражение должно давать завышенные значения поляризационного отношения полного излучения центра в случае частичного заселения дырками подуровня E_1 .

Примеры аппроксимации экспериментальных данных показаны на рис. 5 и 6.

В целом результаты аппроксимации показали, что экспериментальные данные по пьезоспектроскопическому поведению низкотемпературной фотолюминесценции центра Mn_{Ga} в GaAs достаточно хорошо могут быть описаны рассмотренной моделью, учитывающей обменное взаимодействие связанной дырки с d -электронами Mn при значениях параметров модели, лежащих в следующих диапазонах: $A = -(4 \pm 1)$ meV, $b_T = -(2.2 \pm 0.6)$ eV, $d_T = -(5.5 \pm 1.5)$ eV. При этом Δ по порядку величины совпадает со спин-орбитальным расщеплением валентной зоны (330 meV) и энергией ионизации центра (110 meV). При $\Delta < 50$ meV никакой выбор величин A , b_T и d_T не позволяет удовлетворительно согласовать расчет и весь набор экспериментальных данных. При $\Delta > 500$ meV согласие между расчетом и экспериментом также хуже, чем при $\Delta = 100-500$ meV и достигается, если абсолютные значения констант деформационного потенциала превосходят аналогичные величины для валентной зоны GaAs, что представляется маловероятным.

Отметим также, что рассмотренная модель предполагает, что спин-орбитальное расщепление исходного состояния связанной дырки (Δ_{SO}) значительно превышает абсолютные величины A и $f_i \varepsilon_i'$. В принципе для акцепторов в GaAs величина этого расщепления может составлять и несколько meV [26], и тогда возможно, что $|A|, |f_i \varepsilon_i'| > |\Delta_{SO}|$. Однако в этом случае при одноосном давлении поляризационное отношение должно неограниченно возрастать с увеличением деформации. Это противоречит экспериментальным данным для центра Mn_{Ga} .

В этой модели в условиях существования в кристалле флуктуаций потенциала можно ожидать уширение линий спектра люминесценции при одноосном давлении из-за изменения с давлением волновых функций связанных дырок. В соответствии с расчетами волновых функций связанных дырок давление увеличивает в них долю составляющих с проекцией момента $\pm 1/2$ (легкие дырки). Это подобно механизму образования хвостов межзонного поглощения приводит к большей делокализации

волновой функции связанной дырки и, следовательно, к повышению вероятности рекомбинации дырок, локализованных на центрах, находящихся в максимуме потенциала, с электронами, находящимися в минимумах потенциала. Последнее означает, что длинноволновый край полосы линии фотолюминесценции уширяется, что и наблюдалось экспериментально в [10].

3. Влияние одноосного давления на спектры возбуждения нейтрального акцептора Mn_{Ga}

Поглощение света, вызывающее переход дырки, локализованной на акцепторе Mn, из основного состояния в мелкое возбужденное, исследовалось в работах [27,28]. Основная часть спектров коэффициента поглощения, полученных в работе [28] при температуре 4.2 K, представлена на рис. 7 и содержит несколько линий поглощения, отвечающих переходам дырок в различные слабосвязанные состояния, подобные возбужденным состояниям мелкого акцептора.

Влияние одноосного давления было исследовано для возбуждения дырок в состояния $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ и $2P_{3/2}(\Gamma_8)$ [28]. Изменение спектров пропускания, связанного с переходами в состояние $2P_{5/2}(\Gamma_8)$, при приложении давления вдоль оси [001] для двух поляризаций света показано на рис. 8.

Линия поглощения расщепляется на четыре компоненты, обозначенные на рис. 8, как a, b, c и d . Поскольку возбужденное состояние при одноосном давлении

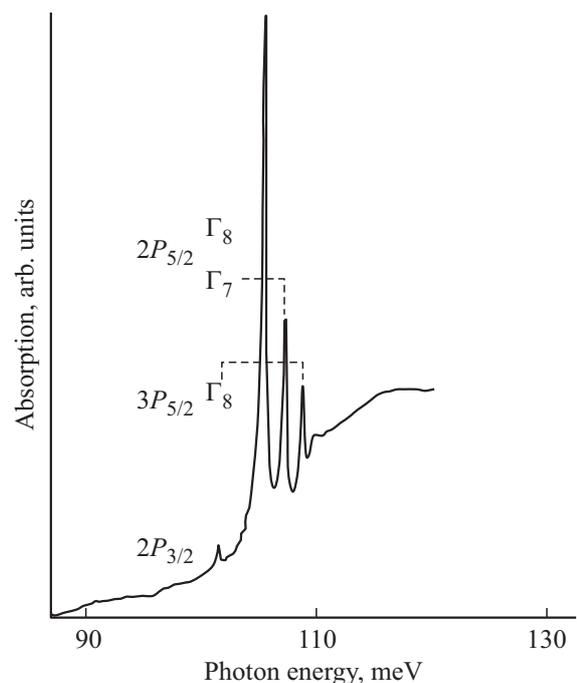


Рис. 7. Спектр поглощения p -GaAs:Mn при 4.2 K [28]. Обозначение линий соответствует конечному состоянию связанных дырок.

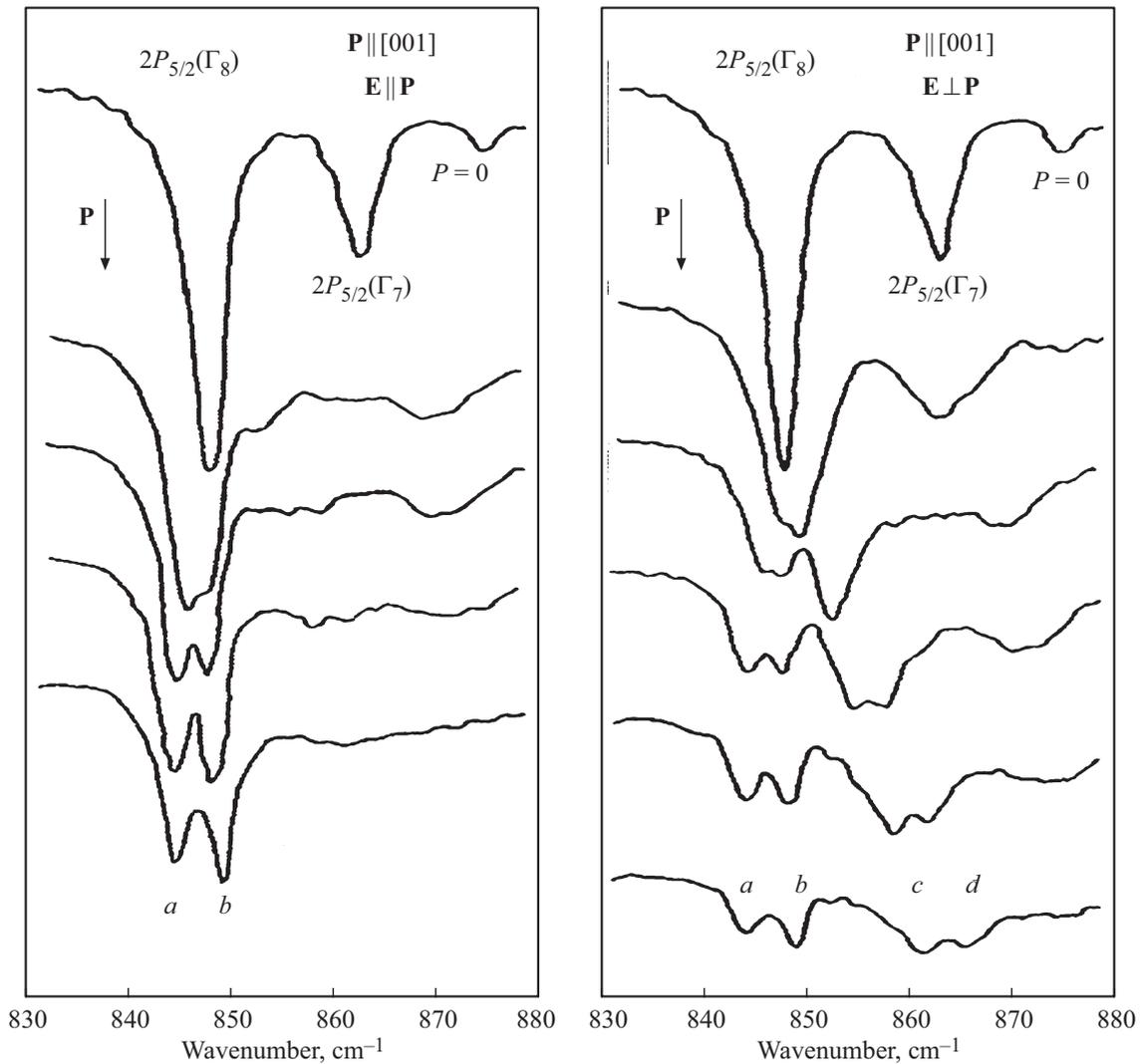


Рис. 8. Влияние одноосного давления на спектры пропускания в области возбуждения дырок в $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ -состояние. Температура ~ 10 К [28]. E — электрический вектор поглощаемого света.

должно расщепляться только на две компоненты, добавочные компоненты связаны с расщеплением основного состояния. Уменьшение относительной интенсивности a и c компонент с ростом давления и противоположное поведение интенсивности b и d компонент (рис. 8) связано с термализацией заселенности расщепившихся подуровней основного состояния, что позволяет по расщеплению компонент a и b (а также c и d) определить величину расщепления подуровней основного состояния $E_1 - E_0$.

Зависимость этого расщепления от величины давления до ~ 200 МПа (2 kbar) для линий переходов в $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ и $2P_{3/2}(\Gamma_8)$ состояния представлена на рис. 9. Видно, что для обоих конечных состояний величина расщепления линии практически совпадает. Это подтверждает, что причиной этого расщепления является расщепление начального состояния.

Экспериментальная зависимость $E_1 - E_0$ от P в [28] аппроксимировалась выражениями, полученными в опи-

санной выше модели обменного взаимодействия дырки в исходном Γ_8 -состоянии с пятью $3d$ -электронами Mn (см. выражения (4)–(7)). При этом величина $\frac{(f_i \epsilon_i')^2}{\Delta}$ принималась равной 0, что допустимо, так как диапазон исследованных давлений (деформаций) ограничивался только низкими давлениями. Хорошее совпадение эксперимента и расчетов (см. кривые на рис. 9) достиглось при $A = -4.4$ meV и константах деформационного потенциала $b_T = -1.17$ eV, $d_T = -3.3$ eV.

Отметим, что диапазон возможных значений A , указанный в [28], составляет 4.4–5.9 meV, однако наиболее вероятными считаются значения, близкие к 4.4 meV. Полная картина влияния одноосных давлений на спектр поглощения при возбуждении дырок в $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ — состояние представлена на рис. 10. Для ее описания в рассматриваемой модели необходимо учесть влияния давления и на возбужденное состояния дырок. Поскольку в этом состоянии амплитуда волновой функции дырки вблизи нуля мала, ее обменным взаимо-

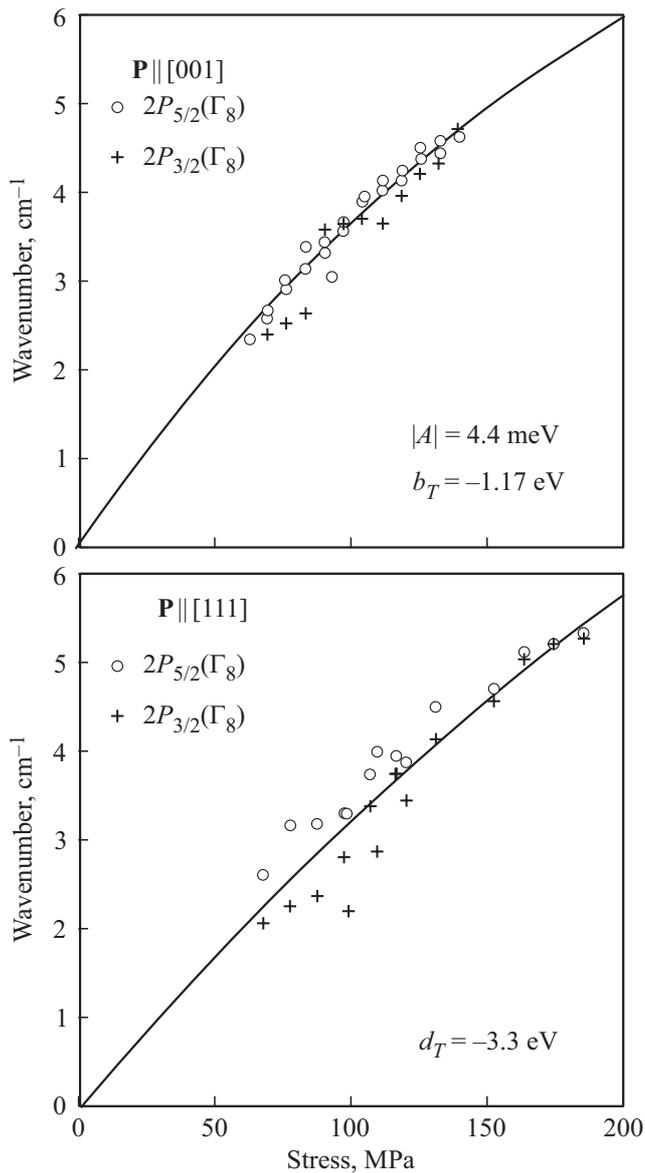


Рис. 9. Зависимость энергетического расстояния между расщепившимися компонентами a и b линий возбуждения связанных дырок в $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ - и $2P_{3/2}(\Gamma_8)$ -состояния от величины одноосного давления [28]. Точки — эксперимент, линии — расчет.

действием с d -электронами можно пренебречь. В этом случае расщепление и сдвиг энергии возбужденного состояния описывается только константами деформационного потенциала для этого состояния b_{Tf} и d_{Tf} и разностью деформационных потенциалов конечного и начального состояний $a_{Tf} - a_T$. Согласно расчета и эксперимента достигается при $b_{Tf} = 0.49$ eV, $d_{Tf} \approx 0$ и $a_{Tf} - a_T = -0.65$ eV. Положительный знак b_{Tf} при этом был определен из поляризации расщепившихся компонент и в дальнейшем подтвержден экспериментами по Зеемановскому расщеплению линии [28]. Расчет [28] также показал, что при давлении вдоль оси [110] существует дополнительное расщепление линии (показано на

рис. 10), возникающее из-за расщепления компоненты основного состояния с проекцией полного момента ± 1 . Однако это расщепление слишком мало, чтобы быть разрешенным в экспериментах [28].

Отметим также, что узость линий поглощения в исследованных в [28] образцах (рис. 7 и 8), полученных диффузией Mn из паровой фазы при температуре 700–800°C, по-видимому свидетельствует об отсутствии в них сильных случайных полей и деформаций.

4. Магнитная восприимчивость нейтральных акцепторов Mn_{Ga}

Магнитная восприимчивость (κ) центров Mn_{Ga} в p -GaAs экспериментально исследовалась в работе [12]. Особенности ее зависимости от температуры интерпретировались в [12] в модели, предполагающей, что дырка, связанная на центре находится в d -оболочке Mn и центр сильно искажен благодаря статическому эффекту Яна–Теллера. Однако существование такого искажения противоречит данным пьезоспектроскопических экспериментов (разделы 2 и 3) и исследованиям ЭПР (раздел 6). Анализ экспериментальных результатов [12] в модели, рассматривающей обменное взаимодействие пяти d -электронов остова Mn с дыркой, связанной на нем в нейтральном состоянии акцептора, был проведен в работе [19].

Согласно [29] магнитная восприимчивость определяется выражением

$$\kappa = NkT \left[\frac{\partial^2(\ln Q)}{\partial H^2} \right]_{H \rightarrow 0} = N \left[\frac{kT}{Q} \frac{\partial^2 Q}{\partial H^2} \right]_{H \rightarrow 0}, \quad (11)$$

где H — индукция магнитного поля, N — концентрация нейтральных акцепторов Mn_{Ga} , Q — статистическая сумма,

$$Q = \sum_n e^{-E_n/kT}. \quad (12)$$

Здесь n и E_n — номер и энергия состояния системы в магнитном поле.

В рассматриваемой модели нейтрального центра Mn_{Ga} гамильтониан \hat{H}' , учитывающий в сферическом приближении взаимодействие пяти $3d$ -электронов и дырки с магнитным полем, имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}' &= \mu_0 g_e (\mathbf{S}_d \mathbf{H}) - \mu_0 g_h (\mathbf{JH}) \\ &= \mu_0 g_e (\mathbf{FH}) - \mu_0 (g_e + g_h) (\mathbf{JH}), \end{aligned} \quad (13)$$

где μ_0 — магнетон Бора, g_e и g_h — соответственно g -факторы электронов в d -оболочке и дырки, связанной на центре. Этот гамильтониан представляет собой поправку к основному гамильтониану центра в отсутствие магнитного поля, в который включено и обменное взаимодействие. Поскольку расщепление уровней вследствие обменного взаимодействия много больше их расщепления в магнитном поле при $H \rightarrow 0$, а уровни энергии центра вырождены, полная энергия, подуровней центра,

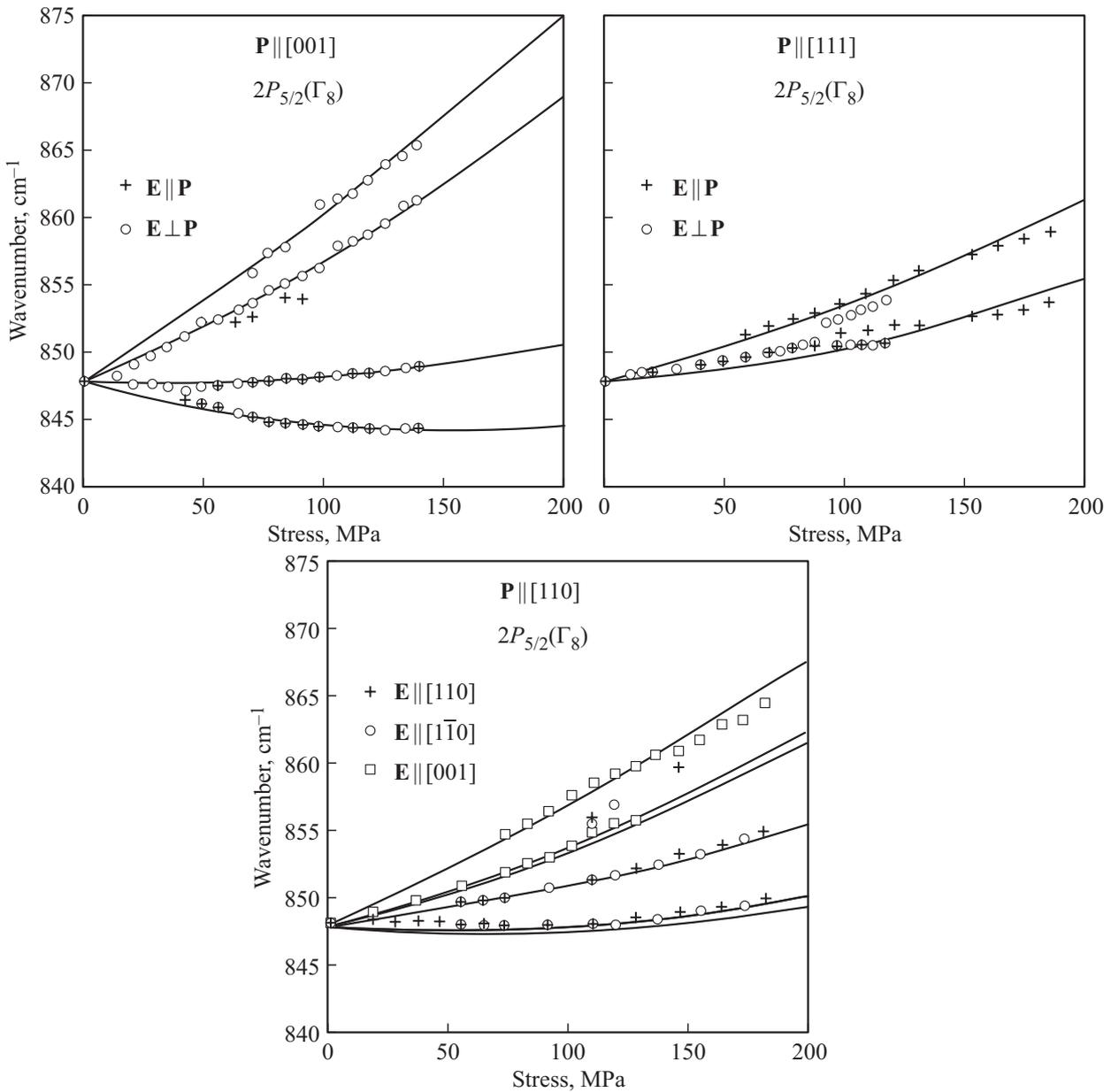


Рис. 10. Влияние одноосных давлений вдоль направлений [001], [111] и [110] на линию поглощения, вызванную возбуждением дырок в $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ -состояние [28]. Точки — эксперимент, линии — расчет при указанных в тексте величинах параметров основного и возбужденного состояния связанной дырки.

характеризуемых значением полного момента F и его проекции m_F , в магнитном поле находится по теории возмущений для вырожденного состояния. С точностью до членов второго порядка по H она определяется выражениями

$$E_n = E_{F,m_F} = E_F^0 + g_F m_F H + (g_e + g_h)^2 \mu_0^2 H^2 \lambda_{F,m_F}$$

$$\lambda_{F,m_F} = \sum_{F' \neq F} \frac{|\langle F, m_F | J_z | F', m_{F'} \rangle|^2}{E_F^0 - E_{F'}^0}, \quad m_F = m_{F'}. \quad (14)$$

Здесь E_F^0 и g_F — полная энергия в нулевом магнитном поле и g -фактор состояния системы с полным моментом F .

Величины g -факторов для состояний нейтрального акцептора Mn_{Ga} с различными значениями полного момента $F = 1, 2, 3, 4$ могут быть получены непосредственными расчетами с использованием волновых функций этих состояний. В сферическом приближении это дает [19,20]

$$g_F = \alpha_F g_e - \beta_F g_h, \quad (15)$$

где коэффициенты α_F и β_F приведены в таблице, а g_e и g_h представляют соответственно g -факторы электрона в d -оболочке и дырки, связанной на центре в исходном состоянии. Полагая, что $g_e = 2$, а $g_h = -1$ [30] можно получить значения g_F , которые также указаны в таблице.

Коэффициенты выражения (15) и g -факторы состояний системы Mn_{Ga} + дырка

F	1	2	3	4
α_F	7/4	11/12	17/24	5/8
β_F	-3/4	1/12	7/24	3/8
g_F	11/4	23/12	41/24	13/8

Использование выражений (11), (12) и (14) дает

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{N}{kT} \frac{\mu_0^2}{Q_0} \left[2g_1^2 + 10g_2^2 \exp\left(\frac{2A}{kT}\right) + 28g_3^2 \exp\left(\frac{5A}{kT}\right) \right. \\ &+ \left. 60g_4^2 \exp\left(\frac{9A}{kT}\right) \right] - \frac{N}{8A} \frac{\mu_0^2}{Q_0} (g_e + g_h)^2 \\ &\times \left[21 - \frac{55}{27} \exp\left(\frac{2A}{kT}\right) - \frac{833}{108} \exp\left(\frac{5A}{kT}\right) - \frac{45}{4} \exp\left(\frac{9A}{kT}\right) \right], \\ Q_0 &= Q|_{H=0} \\ &= 3 + 5 \exp\left(\frac{2A}{kT}\right) + 7 \exp\left(\frac{5A}{kT}\right) + 9 \exp\left(\frac{9A}{kT}\right). \end{aligned} \quad (16)$$

При низких температурах ($kT \ll |A|$) дырками заселено только основное состояние акцептора и из (16) и (17) при $A < 0$ следует, что

$$\kappa = \frac{2}{3} \frac{N\mu_0^2}{kT} g_1^2 + \frac{7N\mu_0^2 (g_e + g_h)^2}{8|A|}, \quad (18)$$

где второе слагаемое представляет собой низкотемпературную ван-флековскую добавку, вызванную взаимодействием основного состояния $F = 1$ с возбужденными. В другом предельном случае при $kT \gg |A|$ происходит разрушение обменной связи тепловым движением и из (15) и (16) следует

$$\kappa = \frac{N\mu_0^2}{3kT} \left(\frac{35}{4} g_e^2 + \frac{15}{4} g_h^2 \right), \quad (19)$$

что отвечает независимому вкладу в магнитную восприимчивость электронов с $S_d = 5/2$ и дырок с $J = 3/2$.

В работе [19] выражение (16) было сопоставлено с экспериментальной зависимостью $\kappa = f(T)$ p -GaAs:Mn, полученной в работе [12]. Согласно [12] концентрация Mn_{Ga}^0 даже при температуре 300 К превышала концентрацию Mn_{Ga} в 20 раз. Поэтому изменением магнитной восприимчивости из-за изменения с температурой концентрации Mn_{Ga}^0 пренебрегалось. Хорошее согласие расчета и эксперимента при приведенных выше значениях g -факторов могло быть достигнуто, если значение A лежало в диапазоне $-(3-5)$ meV (рис. 11), что совпадает с результатами анализа пьезоспектроскопических экспериментов (см. разделы 2 и 3).

Магнитная восприимчивость p -GaAs:Mn исследовалась и в работе [31]. Зависимость $\kappa = f(T)$ была измерена для образца с концентрацией Mn

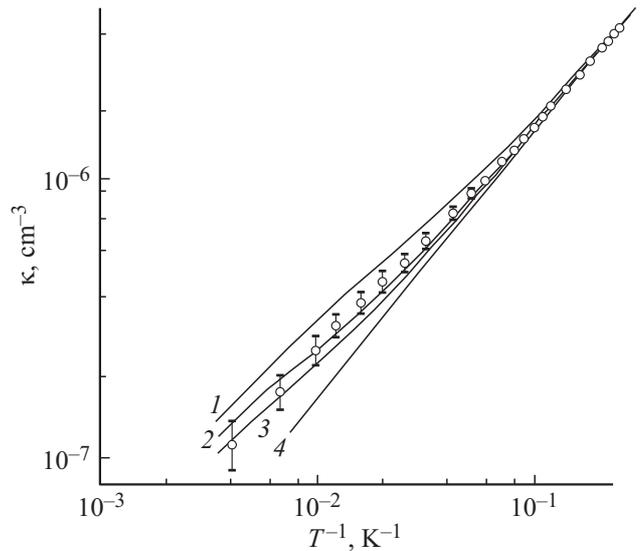


Рис. 11. Температурная зависимость объемной магнитной восприимчивости, связанной с примесью Mn в p -GaAs. Образец, с концентрацией Mn по данным химического анализа $5.6 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Точки — эксперимент [12]. Сплошные линии — расчет [19] при концентрации нейтральных центров $5.3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ и различных значениях A , meV: 1 — -2 , 2 — -5 , 3 — -8 , 4 — $-\infty$. Величины g -факторов взяты из таблицы.

$(5.1 \pm 1.0) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (определено методом спектроскопии вторичных ионов) в диапазоне температур $\sim 7-200$ К и анализировалась в рамках рассматриваемой выше модели дырки, обменно взаимодействующей с пятью $3d$ -электронами. Для аппроксимации экспериментальных данных в [31] использовались только выражения (18) и (19), полученные в пределе низких и высоких температур. Величина A оценивалась из величины ван-флековского вклада в низкотемпературную магнитную восприимчивость (второй член выражения (18)). Этот вклад определялся в соответствии с выражениями (18) и (19) разницей между величинами магнитной восприимчивости, полученными экстраполяцией низкотемпературной и высокотемпературной частей зависимости $\kappa = f(T^{-1})$ к прямой $T^{-1} = 0$ (рис. 12).

Такая процедура позволила, не вычисляя величины g_2 , g_3 и g_4 , из экспериментальных данных [31] определить величину $2|A|$, которая оказалась равной 2.5 ± 0.5 meV.

Однако, как видно из рис. 12, линейная зависимость магнитной восприимчивости от обратной температуры при высоких температурах, используемая для определения поправки Ван-Флека и определения из нее величины $2A$, имеет наклон намного ниже, чем следует из выражения (19) (Согласно (18) и (19) наклоны низкотемпературной и высокотемпературной частей зависимостей $\kappa = f(1/T)$ при используемых в [31] значениях g -факторов, которые практически совпадают с указанными выше, должны различаться почти в 2.5 раза). Кроме того, как показывают вычисления, при $A = -(1-1.5)$ meV высокотемпературный линейный

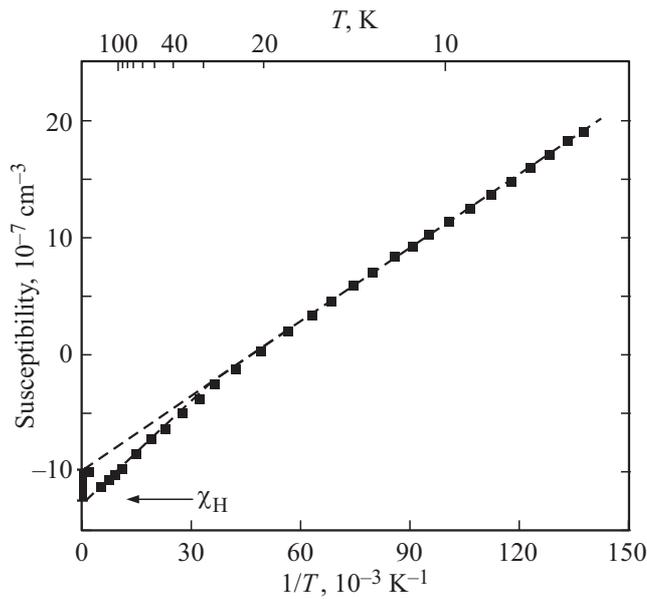


Рис. 12. Зависимость магнитной восприимчивости образца p -GaAs:Mn с концентрацией Mn $5.1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ от температуры [31]. χ_H — диамагнитный вклад GaAs.

участок на зависимости $\kappa = f(1/T)$ должен наблюдаться только при температурах выше 100 К, тогда как на экспериментальной зависимости линейный участок начинается уже при 30 К. В то же время даже при $A = -1.5 \text{ meV}$ низкотемпературный участок линейной зависимости, описываемый выражением (18), должен существовать только в области температур ниже 10 К, тогда как аппроксимация экспериментальной зависимости этим выражением в работе [31] включает и значения, полученные при температуре 15 К, где согласно (16) и (17) величины κ должны быть выше, чем получаемые из (18). Эти отклонения экспериментальных данных от теоретических выражений, согласно которым и произведена оценка величины A [31], показывают, что полученные значения константы обменного взаимодействия являются неправильными.

Одной из причин отличия экспериментальных данных от зависимости, описываемой выражениями (16) и (17), может быть присутствие в образце других парамагнитных центров. Действительно, спектры ЭПР, измеренные в [31], указывают на присутствие в исследованных образцах, кроме и Mn_{Ga}^- , сигналов от парамагнитных центров связанных с комплексами, содержащими Mn (см. раздел 6).

Следует также отметить, что высокотемпературные величины магнитной восприимчивости [31] лежат ниже, чем предсказывается выражениями (16) и (17) при принятых в [31] значениях g -факторов дырки и $3d$ -электронов. Эта же тенденция видна и в результатах работы [12] (рис. 11).

Такое уменьшение величины магнитной восприимчивости при высоких температурах можно связать с расщеплением энергии состояний с различными F под

влиянием деформации, связанной с неполносимметричными фононами (локальными и акустическими), которое не учитывалось при выводе выражений (16) и (17). При этом в случае взаимодействия с локальными фононами эффект Яна–Теллера, вызванный этим взаимодействием, должен быть динамическим даже при температурах жидкого гелия, поскольку в исследованиях при одноосных давлениях (разделы 2 и 3) никаких заметных признаков существования статического эффекта Яна–Теллера в основном состоянии Mn_{Ga}^0 не было обнаружено.

На низкотемпературную магнитную восприимчивость центра Mn_{Ga} могут также оказывать влияние случайные внутренние электрические или деформационные поля, действие которых существенно, когда вызываемое ими расщепление уровней центра порядка или больше kT . Для оценки этого влияния в [19] была рассмотрена модель, считающая, что случайное поле действует только на состояние дырки, которая уже посредством обменного взаимодействия перестраивает все состояние центра. Для простоты полагалось, что случайные поля для всех центров одинаковы и однородно распределены по направлениям, а величина, вызываемого ими расщепления исходного состояния δ не зависит от угла между полем и осями кристалла. В этом случае добавка к гамильтониану, описывающая расщепление состояния дырки с моментом $3/2$ на состояния с проекциями момента $\pm 3/2$ и $\pm 1/2$ на направление случайного поля z' имеет вид

$$\hat{H}' = \frac{\delta}{2} \left(J_{z'}^2 - \frac{5}{4} \right). \quad (20)$$

Здесь не учитывается сдвиг уровней в целом, так как это не отражается на заполнении подуровней отдельного акцептора. При низкой температуре нужно учитывать только уровень $F = 1$. Последнее является следствием условия $|\delta| \ll |A|$, в силу которого вклад в магнитную восприимчивость уровней с $F = 2, 3, 4$ имеет место только при $kT \gg |\delta|$, то есть тогда, когда подуровни, расщепившиеся из-за случайного поля заселены одинаково.

Тогда гамильтониан, описывающий влияние случайных полей и внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси z , при низких температурах примет вид

$$\hat{H}'_{F=1} = \delta_1 \left(F_{z'}^2 - \frac{2}{3} \right) + \mu_0 g_1 F_z H, \quad (21)$$

где $\delta_1 = 3\delta/20$. Поскольку при определении магнитной восприимчивости предполагается, что $H \rightarrow 0$ (см. выражение (11)), необходимо считать, что $|\mu_0 g_F H| \ll |\delta|$. В этом случае член, содержащий H в (21), представляет собой небольшую поправку и при вычислении магнитной восприимчивости удобно ось квантования выбрать вдоль z' . Тогда

$$\hat{H}'_{F=1} = \delta_1 \left(m_1^2 - \frac{2}{3} \right) + \mu_0 g_1 [F_{z'} \cos \theta + F_x \sin \theta] H, \quad (21a)$$

где $m_1 = 0, \pm 1$, θ — угол между направлением случайного поля и магнитного поля, а ось x' перпендикулярна оси z' и лежит в плоскости, содержащей z'

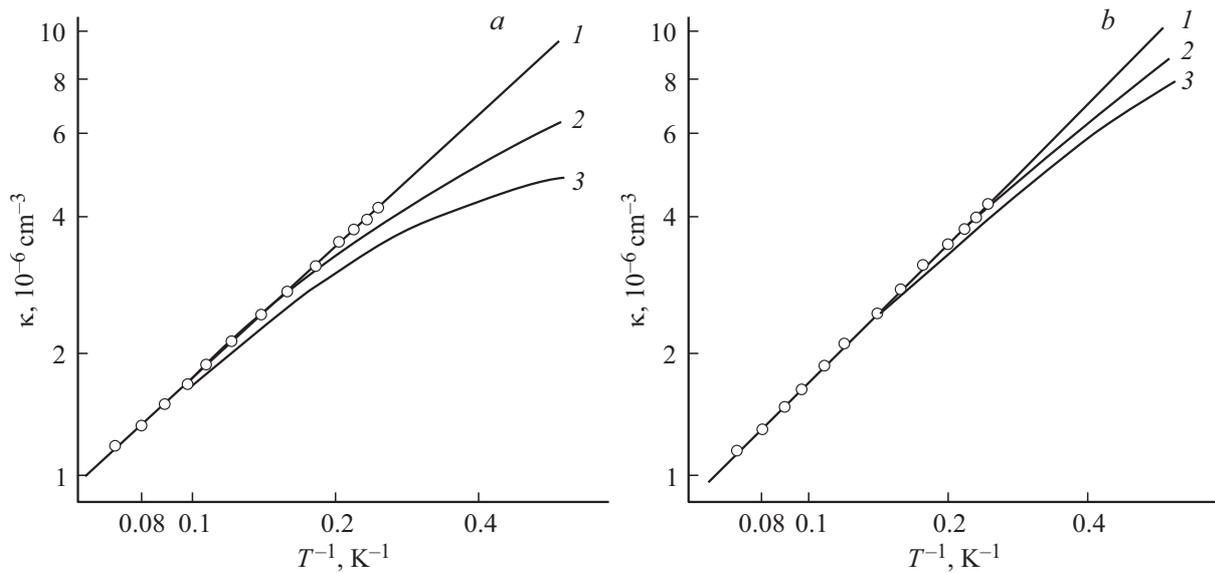


Рис. 13. Сопоставление низкотемпературной части зависимости $\kappa(T)$ с расчетами, учитывающими влияние случайных полей. Точки — эксперимент для образца с концентрацией $Mn\ 5.6 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$ [12]. Сплошные линии — расчет по формуле (22) при следующих значениях $|\delta_1|$ (meV): 1 — 0, 2 — 0.4, 3 — 0.6; а — $\delta_1 > 0$, б — $\delta_1 < 0$.

и индукцию магнитного поля. Это дает следующие энергии расщепившихся подуровней с точностью до членов пропорциональных H^2

$$E_{1,0} = -\frac{2}{3}\delta_1 - \frac{\sin^2\theta}{\delta_1}(\mu_0g_1H)^2,$$

$$E_{1,\pm 1} = \frac{\delta_1}{3} + \frac{\sin^2\theta}{2\delta_1}(\mu_0g_1H)^2$$

$$\pm \sqrt{(\mu_0g_1H)^2 \cos^2\theta + (\mu_0g_1H)^4 \frac{\sin^4\theta}{4\delta_1^2}}. \quad (21b)$$

Учет различных ориентаций электрического поля при вычислении κ сводится вместо умножения на число центров N , как в (11), к интегрированию по $dN(\theta)$, где $dN(\theta)$ — доля центров, подверженных воздействию случайного поля, направленного под углом θ в интервале $\theta \div \theta + d\theta$ к магнитному полю. При равномерном распределении направлений случайных полей по углам вычисления приводят к выражению

$$\kappa = N \frac{2(\mu_0g_1)^2}{3kT} \frac{\left(1 - \frac{2kT}{\delta_1}\right) \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right) + \frac{2kT}{\delta_1} \exp\left(\frac{2\delta_1}{3kT}\right)}{\exp\left(\frac{2\delta_1}{3kT}\right) + 2 \exp\left(-\frac{\delta_1}{3kT}\right)}. \quad (22)$$

При $kT \ll |\delta_1|$

$$\kappa = \frac{4N(\mu_0g_1)^2}{3\delta_1}, \quad \text{если } \delta_1 > 0,$$

$$\kappa = \frac{N(\mu_0g_1)^2}{3kT}, \quad \text{если } \delta_1 < 0.$$

При $A \gg kT \gg |\delta_1|$ (22) переходит в (18), как и следовало ожидать, поскольку все расщепившиеся подуровни состояния с $F = 1$ заселены одинаково.

Выражение (22) может быть использовано для оценки максимально возможной величины δ_1 в образце, исследованном в работе [12]. С этой целью низкотемпературная часть экспериментальной зависимости $\kappa = f(T^{-1})$ сопоставлялась с расчетом при различных значениях δ_1 . Результаты такого сопоставления представлены на рис. 13 и показывают, что δ_1 по крайней мере не превышает 0.4 meV.

5. Спектры рамановского рассеяния, связанные с нейтральными акцепторами Mn_{Ga}^0

Оценка константы обменного взаимодействия для Mn_{Ga}^0 проводилась и по спектрам рамановского рассеяния [17,32]. Концентрация атомов Mn в образцах [17] составляла $\sim 1\%$, в то время как в образцах, исследованных в [32] она была $0.6-3.4 \cdot 10^{18}\text{ cm}^{-3}$. Спектр рамановского рассеяния в образце $Ga_{1-x}Mn_xAs$ ($x < 0.006$) при температуре 4 К представлен на рис. 14. Широкая полоса этого спектра с максимумом около 34 cm^{-1} ($\Delta\hbar\omega \approx 4.2\text{ meV}$) приписывается переходу из состояния с $F = 1$ в состояние с $F = 2$. Аналогичная полоса наблюдалась и в работе [32]. Исходя из положения максимума этой полосы, константа обменного взаимодействия в [17,32] считалась равной $-(2.1 \pm 0.1)\text{ meV}$. Однако, в условиях сильного уширения полосы рамановского рассеяния из-за случайных внутренних деформаций или электрических полей величина расщепления $F = 1$ и $F = 2$ состояний, в отсутствие случайных полей равная $2|A|$, не совпадает с положением максимума рамановского спектра, а может соответствовать более высокой энергии.

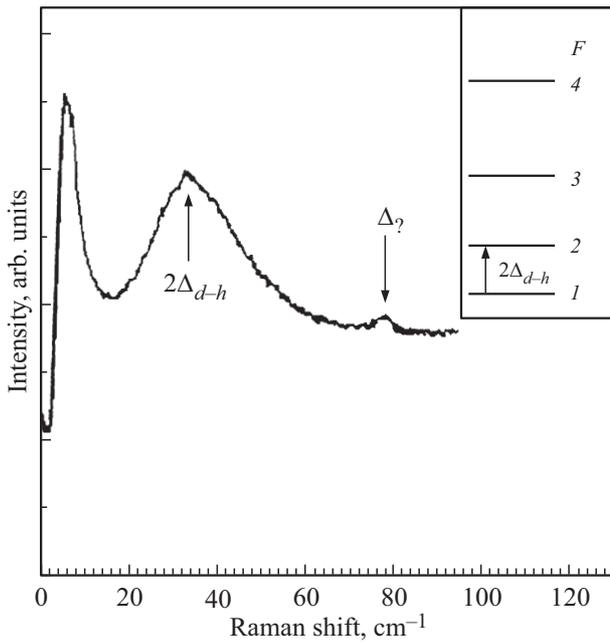


Рис. 14. Спектр рамановского рассеяния в образцах p -GaAs:Mn [17]. $T = 4$ K.

В более поздней работе [33] рамановское рассеяние исследовалось при приложении к кристаллу одноосного давления и магнитного поля. Величина $|A|$ была оценена из данных о расщеплении максимумов полосы рамановского рассеяния в условиях одноосного давления вдоль оси $[111]$ и магнитного поля, направленного вдоль оси $[1\bar{1}0]$. Расщепление уровней в случайных внутренних полях считалось постоянным для всех центров и моделировалось с помощью давления вдоль оси $[100]$. Для согласования расчетов с экспериментом принималось, что константа обменного взаимодействия линейно меняется со $\text{Sp}(\epsilon)$. (В определении величины параметра, описывающего это изменение допущены ошибки). Абсолютная величина A в отсутствии внешней деформации оказалась равной 2.6 meV . При этом наблюдалось, что расщепление F_1 — состояния в случайных полях ($|\delta_1|$) в исследованном образце составляет $0.6\text{--}0.7 \text{ meV}$. Это в рассматриваемой нами модели, использовавшейся и в работе [33], означает (см. раздел 4), что эффективное расщепление $|\delta|$ исходного Γ_8 -состояния дырки, связанной на центре, в случайных полях равно $4\text{--}5 \text{ meV}$ и заметно превышает по абсолютной величине полученную константу обменного взаимодействия. Последнее не соответствует ограничениям применимости модели центра, предполагающей, что исходное расщепления в случайных полях меньше константы обменного взаимодействия, и приводит к тому, что непосредственное ее использование, строго говоря, не может дать точную оценку параметров центра.

Сильное расщепление электронных состояний под влиянием случайных полей в образце, исследованном в работе [33], подтверждается и спектром излучения, обу-

словленным рекомбинацией электрона и дырки, локализованной на Mn_{Ga}^0 . Как видно из этого спектра, первое фонное повторение основной линии, отстоящее от нее на $\sim 35 \text{ meV}$ (см. рис. 1 в [33]) из-за уширения этих линий проявляется только в виде плеча, а не в качестве отдельного пика.

Указанные обстоятельства не позволяют определить реальную погрешность оценки константы обменного взаимодействия, приводимой в работах [17,32,33], и тем самым установить, согласуется ли она с оценками, приведенными в разделах 2 и 3.

6. Электронный парамагнитный резонанс, связанный с Mn_{Ga} в p -GaAs

Исходя из оценок g -факторов, сделанных в разделе 4, можно ожидать, что в спектре ЭПР p -GaAs:Mn при низких температурах должен существовать резонанс, отвечающий значению g -фактора $g_1 \approx 2.75$ для разрешенных переходов в основном состоянии нейтрального акцептора ($\Delta m_F \pm 1$). Кроме того, может наблюдаться также сигнал с g -фактором $\sim 2g_1$ („запрещенные“ переходы с $\Delta m_F = \pm 2$). Одновременно, если часть центров Mn_{Ga} компенсирована донорами, то есть, захватив электрон, стала отрицательно заряженными центрами, должен наблюдаться резонанс с g -фактором $g_e \approx 2$, возникающий из-за расщепления состояния $3d^5$ -электронов Mn в магнитном поле. Сигналы, соответствующие таким резонансам, действительно наблюдались в ряде исследований [15,34–38].

ЭПР, связанный с центрами Mn_{Ga}^- , был изучен еще в ранних работах [34,35]. На рис. 15 представлены спектры сигнала ЭПР, (производной от коэффициента поглощения электромагнитного излучения по магнитному полю в зависимости от величины этого поля), полученные в [34]. Согласно общим представлениям в этом случае спиновый гамильтониан, описывающий расщепление состояний $3d^5$ -электронов в магнитном поле с индукцией \mathbf{H} , имеет вид [34]

$$\hat{H} = g_e \mu_0 \mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_d + \alpha' \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{I} + \frac{\beta'}{6} \left[S_{dx}^4 + S_{dy}^4 + S_{dz}^4 - \frac{1}{5} S_d(S_d + 1)(3S_d^2 + 3S_d - 1) \right]. \quad (23)$$

Здесь первый член представляет собой зеемановское расщепление состояния пяти d -электронов с полным спином $5/2$, второй член описывает взаимодействие электронного спина со спином ядра Mn I (сверхтонкое взаимодействие), а третий член — взаимодействие $3d$ -электронов с кубическим кристаллическим полем (тонкое взаимодействие), α' — константа сверхтонкого взаимодействия, β' — константа тонкого взаимодействия.

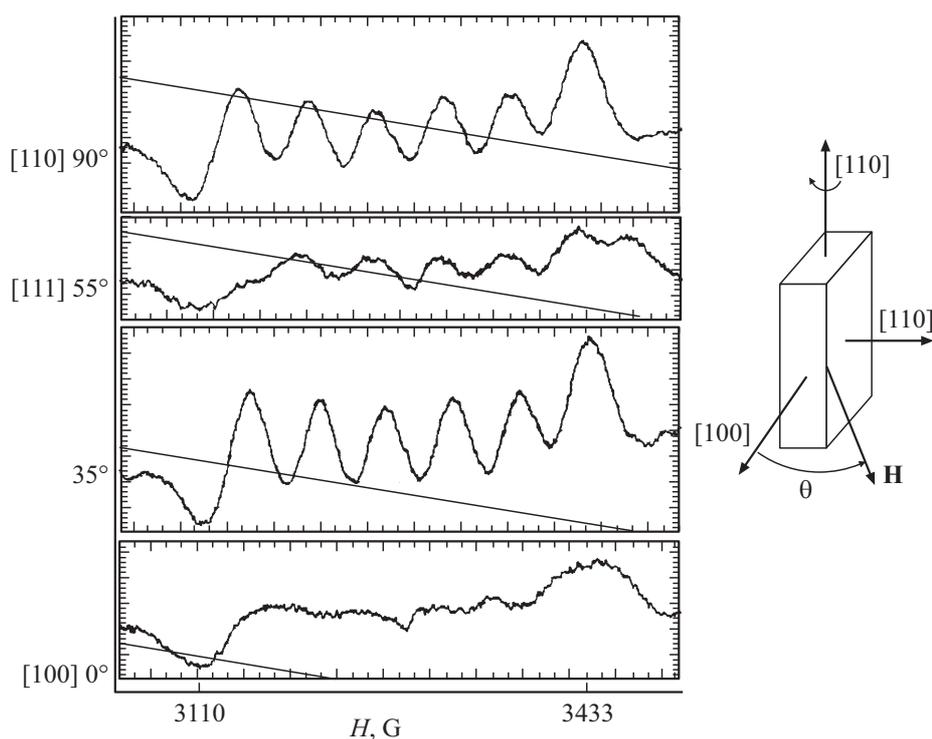


Рис. 15. Спектры ЭПР, связанные с переходами в d -оболочке Mn в GaAs:Mn при различных углах θ между направлением магнитного поля и осью [100]. Температура 77 K, частота электромагнитного излучения 9.1 GHz [34].

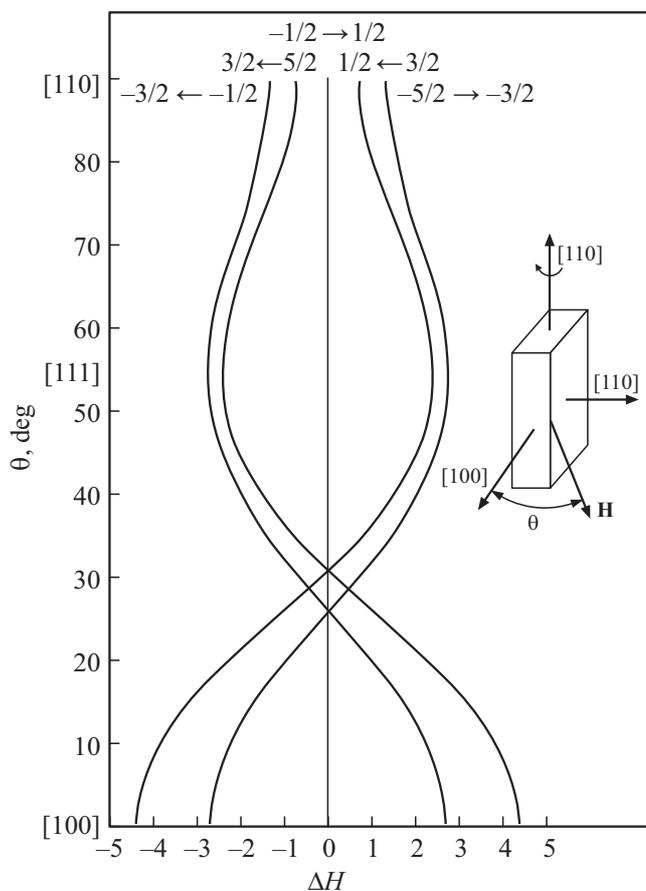


Рис. 16. Рассчитанная угловая зависимость положения резонансных линий тонкой структуры относительно линии сверхтонкой структуры в спектрах ЭПР Mn в решетке цинковой обманки [34]. Цифры около кривых обозначают начальные и конечные значения проекции полного спина $3d$ -электронов при резонансном переходе.

Поскольку для атома Mn $I = 5/2$ и проекции спина ядра имеют 6 значений: $m_I = \pm 1/2, \pm 3/2, \pm 5/2$, в соответствии с выражением (23) спектр ЭПР должен содержать шесть линий сверхтонкой структуры, вокруг каждой из которых группируются по пять линий тонкой структуры. Однако, экспериментально в GaAs:Mn при температуре 4 и 77 К наблюдалось только 6 линий сверхтонкого взаимодействия (рис. 15), которые соответствуют переходам при индукции магнитного поля, удовлетворяющей условию

$$\hbar\omega - \alpha' m_I = \mu_0 g_e H, \quad (24)$$

где ω — круговая частота частота электромагнитного излучения спектрометра ЭПР. Как следует из экспериментальных данных (рис. 15), величина α' составляет 56 ± 2 Г, а g_e , как и ожидается, близко к величине для свободного электрона и равно 2.004 ± 0.003 .

Как видно из рис. 15, ширина линий сверхтонкого взаимодействия изменяется с изменением угла θ между направлением магнитного поля и осью [100]. При этом центральные компоненты спектра становятся неразличимыми, когда магнитное поле совпадает с осью [100], а наилучшее разрешение достигается при $\theta \approx 35^\circ$. Этот эффект был объяснен в работе [34] влиянием резонансных линий, появляющихся вследствие тонкого взаимодействия, положение которых зависит от угла θ . Как уже упоминалось, эти линии группируются вокруг каждой из линий, связанных с сверхтонким взаимодействием (рис. 16). Однако в эксперименте они не разрешаются из-за уширения каждой линии резонанса, а вносят существенный дополнительный вклад в ширину каждой линии сверхтонкого резонанса. Этот вклад минимален при минимальном расстоянии линий тонкого резонанса от линии сверхтонкого резонанса, которое согласно расчетам (рис. 16) соответствует $\theta = 31^\circ$, и максимален при максимальных значениях этих расстояний, отвечающих $\theta = 0$. Это хорошо согласуется с данными экспериментов (рис. 15). Данные при других значениях θ (рис. 15) также согласуются с результатами расчетов, представленных на рис. 16. Оценка верхнего предела для константы тонкого взаимодействия β' , проведенная в рамках указанных представлений, дает величину 3.5 Г [34]. Совпадение спектров ЭПР при температурах 77 и 4 К связано с тем, что и в том и другом случае все состояния, участвующие в резонансных переходах, заселены практически равномерно.

ЭПР, связанный с разрешенными переходами в нейтральном акцепторе Mn_{Ga}^0 ($\Delta m_F = \pm 1$, g -фактор ~ 2.77), был обнаружен и идентифицирован намного позднее [15]. Это явилось сильным аргументом в пользу обменной модели нейтрального акцептора. Наряду с этим резонансом в работе [15] наблюдался также сигнал, g -фактор которого был равен 5.72. Этот сигнал идентифицировался, как соответствующий переходам с $\Delta m_F = \pm 2$ в том же нейтральном акцепторе. Спектры сигнала ЭПР, полученные в [15], представлены на рис. 17.

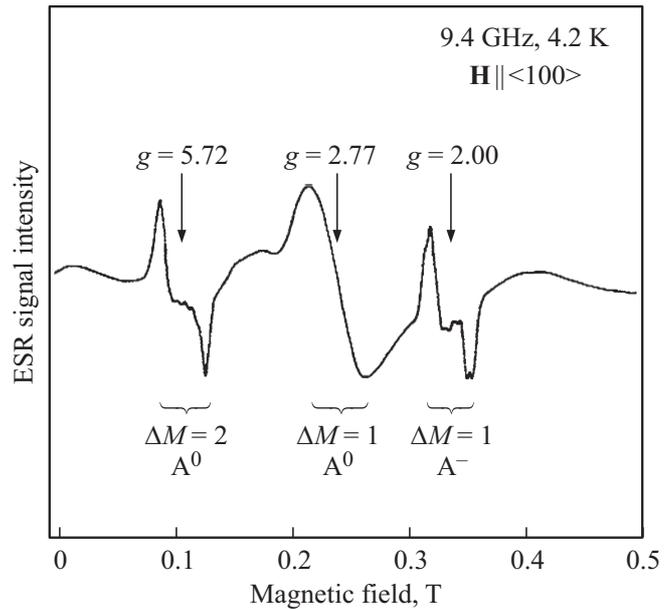


Рис. 17. Спектр ЭПР p -GaAs:Mn, содержащий сигналы от нейтрального (A^0) и отрицательно заряженного (A^-) акцепторного центра Mn [13]. Температура — 4.2 К, частота электромагнитного излучения — 9.4 GHz.

Для переходов с $\Delta m_F = \pm 2$ в Mn_{Ga}^0 , как и для разрешенных переходов в Mn_{Ga}^- , в экспериментальных спектрах видна структура, обусловленная сверхтонким взаимодействием со спином ядра. Величины константы сверхтонкого взаимодействия равны $52 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ для Mn_{Ga}^- , что согласуется с данными [34,35], и $84 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$ для Mn_{Ga}^0 . Для разрешенных переходов в Mn_{Ga}^0 структура, вызванная сверхтонким взаимодействием, не обнаруживается из-за значительного уширения спектров этого резонанса. Позднее подобный спектр ЭПР с величинами g -факторов для разрешенных и „запрещенных“ переходов в Mn_{Ga}^0 соответственно 2.82 и 5.635 наблюдался и в работе [39].

В указанных выше работах подразумевалось, что спектры ЭПР обусловлены магнитодипольными переходами, интенсивность которых не зависит от ориентации магнитного поля и поляризации электромагнитного излучения относительно осей кристалла. Однако, позднее было обнаружено [40], что в случае Mn_{Ga}^0 такая зависимость существует и хорошо описывается в предположении определяющей роли в экспериментах по исследованию спектров ЭПР электродипольных переходов между расщепившимися подуровнями основного состояния центра. В этом случае разрешенными становятся и переходы с $\Delta m_F = \pm 2$. Как показано в [40], матричные элементы для переходов в случае отсутствия уширения из-за случайных полей и деформаций связаны с параметрами, характеризующими ориентацию электромагнитного излучения и постоянного магнитного поля, а также состояния, между которыми осуществляются переходы, следующими

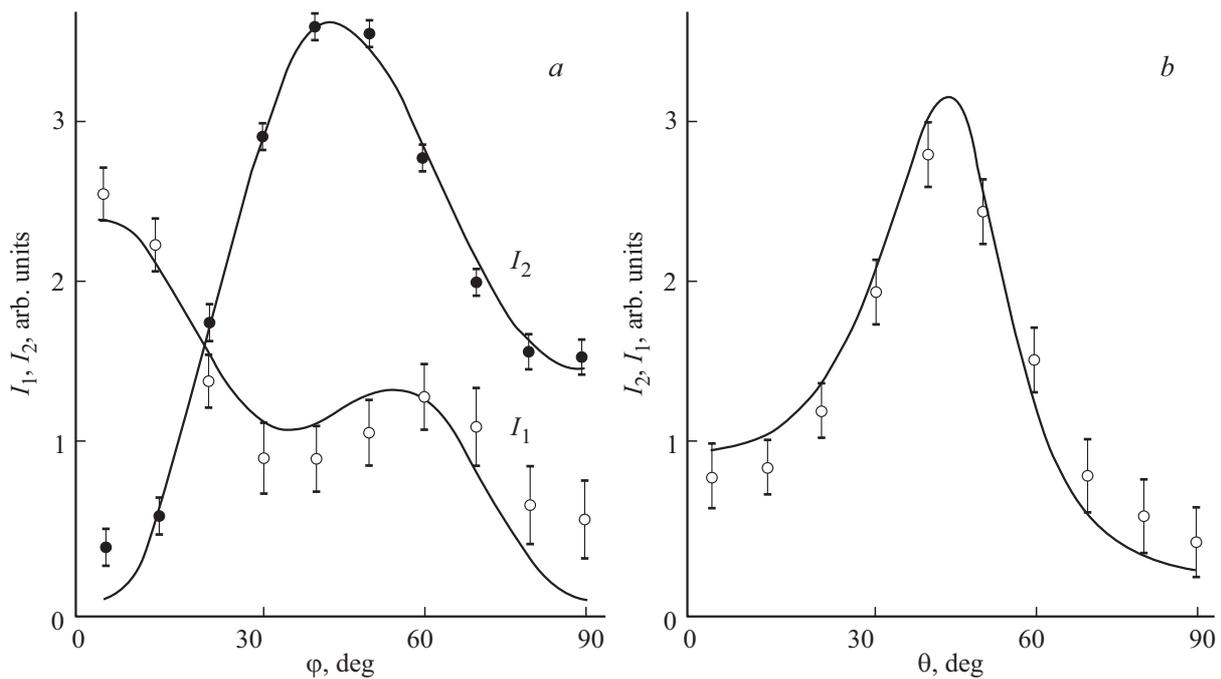


Рис. 18. Угловые зависимости интегральной интенсивности сигналов ЭПР в центре Mn_{Ga}^0 (образец GaAs с концентрацией атомов $Mn 5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) [40]. Температура 4.2 К.

соотношениями

$$|M_{0,-1}^E|^2 = \frac{1}{4} \alpha^2 E_1^2 |\langle 1, 0 | F_+ | 1, -1 \rangle|^2 f_1(\bar{e}, \bar{h}), \quad (25)$$

$$|M_{1,0}^E|^2 = \frac{1}{4} \alpha^2 E_1^2 |\langle 1, 1 | F_+ | 1, 0 \rangle|^2 f_1(\bar{e}, \bar{h}), \quad (26)$$

для переходов с $\Delta m_F = \pm 1$ и

$$|M_{1,-1}^E|^2 = \frac{1}{4} \alpha^2 E_1^2 |\langle 1, 1 | F_+^2 | 1, -1 \rangle|^2 f_2(\bar{e}, \bar{h}), \quad (27)$$

для переходов с $\Delta m_F = \pm 2$.

Здесь α — константа электродипольного взаимодействия, E_1 — амплитуда электрического вектора электромагнитного поля, $F_+ = F_x + iF_y$, где в системе координат x, y, z ось z направлена вдоль напряженности постоянного магнитного поля $f_1(\bar{e}, \bar{h})$ и $f_2(\bar{e}, \bar{h})$ — функции, зависящие от направлений электрического вектора электромагнитного излучения и напряженности постоянного магнитного поля, задаваемых единичными векторами \bar{e} и \bar{h} соответственно.

$$f_1(\bar{e}, \bar{h}) = 1 - [e_{x'}^2 (h_{x'}^2 + 4h_{y'}^2)]_{\text{cp}} + 2[e_{x'} e_{y'} h_{x'} h_{y'} (1 - 4h_z^2)]_{\text{cp}}, \quad (28)$$

$$f_2(\bar{e}, \bar{h}) = [e_{x'}^2 (h_{x'}^2 + h_{y'}^2 h_z^2)]_{\text{cp}} - 2[e_{x'} e_{y'} h_{x'} h_{y'} (h_{x'}^2 + h_{y'}^2)]_{\text{cp}}, \quad (29)$$

где $[\dots]_{\text{cp}}$ означает сумму трех слагаемых, полученных циклической перестановкой индексов x', y', z' , обозначающих оси прямоугольной системы координат, направленные вдоль кристаллических осей типа (001).

В случае небольшого уширения сигнала ЭПР, когда смешивание расщепившихся в магнитном поле состояний мало и по-прежнему доминирующими являются электродипольные переходы, угловые зависимости, определяемые выражениями (25)–(29), сохраняются для интегральной интенсивности ЭПР.

Эта интенсивность I_1 и I_2 для переходов с $\Delta m_F = \pm 1$ и $\Delta m_F = \pm 2$ соответственно была измерена в экспериментах [40] при различных углах φ между электрическим вектором электромагнитного излучения и осью [001] или θ между этой осью и напряженностью постоянного магнитного поля. При этом геометрия экспериментов была такой, что переменное магнитное поле было всегда перпендикулярно постоянному магнитному полю, и согласно [40] в первом случае выражения (28) и (29) имели вид

$$f_1(\bar{e}, \bar{h}) = \cos^2 \varphi (1 - 3 \sin^2 \varphi \cos 2\varphi), \quad (30)$$

$$f_2(\bar{e}, \bar{h}) = \frac{1}{4} \sin^2 \varphi (1 + 5 \cos^2 \varphi + 6 \cos 4\varphi), \quad (31)$$

а во втором случае было справедливо соотношение

$$\frac{f_2(\bar{e}, \bar{h})}{f_1(\bar{e}, \bar{h})} = \frac{1}{4} \frac{1 + 3 \cos^2 \theta (1 + \sin^2 \theta)}{1 - (3/4) \sin^2 2\theta}. \quad (32)$$

Сопоставление экспериментальных данных с выражениями (30), (31) и (32) (рис. 18) демонстрирует хорошее согласие и показывает, что определяющую роль в спиновом поглощении центра Mn_{Ga}^0 играют электродипольные переходы. Причиной этого, как показано для мелких акцепторов в InSb [41], может быть отсутствие

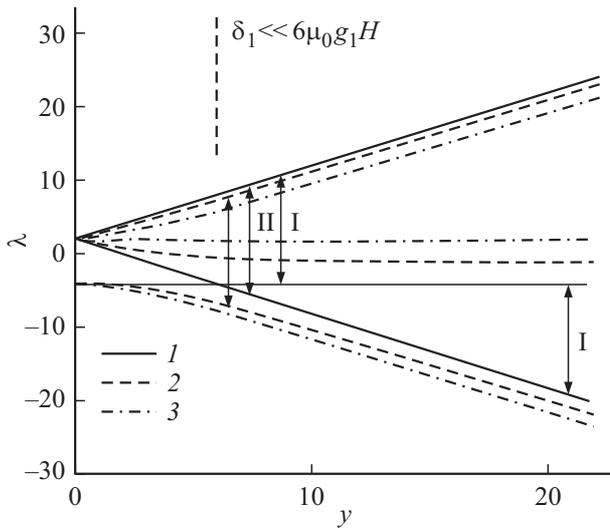


Рис. 19. Схема расщепления основного состояния Mn_{Ga}^0 в магнитном поле при различных углах между направлениями магнитного и случайных полей. θ , deg.: 1 — 0, 2 — 45, 3 — 90. Стрелками I указаны переходы с $\Delta m_F = \pm 1$, II — переходы с $\Delta m_F = \pm 2$.

центра инверсии в полупроводниках $A^{III}B^V$, вызывающее появление кубических по волновому вектору слагаемых в спектре валентной зоны. Наличие такого слагаемого приводит к появлению дипольного момента акцептора, что означает разрешение электродипольных переходов между его состояниями, расщепившимися в магнитном поле. Поскольку состояние дырки, локализованной на акцепторе Mn, в значительной степени подобно состоянию дырки на мелком акцепторе, можно ожидать что электродипольные переходы вероятны и в этом случае. Действительно, используя данные о валентной зоне GaAs, приведенные в работе [42], по аналогии с оценками [41] можно показать, что для GaAs вероятность электродипольных переходов в ЭПР в случае мелкого акцепторного центра на несколько порядков превышает вероятность магнитодипольных.

Как уже упоминалось, спектры сигналов ЭПР для переходов $\Delta m_F = \pm 1$ в нейтральном центре Mn_{Ga} оказались уширены значительно сильнее, чем спектр сигнала Mn_{Ga}^- . Причиной такого уширения являются случайные электрические и деформационные поля в кристалле. Эти поля не расщепляют состояние Mn_{Ga}^- , поскольку такой центр имеет заполненные валентные связи и остов, содержащий пять $3d$ -электронов, который характеризуется нулевым орбитальным моментом. Напротив, нейтральное состояние этого центра ($3d^5$ -электроны + дырка) в основном состоянии обладает орбитальным моментом и потому расщепляется под влиянием этих факторов.

Выяснение причины более слабого уширения линий ЭПР, вызванных переходами с $\Delta m_F = \pm 2$ в Mn_{Ga}^0 , требует более детального анализа. Рассмотрим, следуя работе [43], влияние случайных полей на расщепление

основного состояния Mn_{Ga}^0 в магнитном поле и переходы между этими состояниями под воздействием электромагнитного излучения. Будем, как и ранее, предполагать, что расщепление исходного состояния нейтрального акцептора Mn под влиянием этих факторов меньше обменного расщепления, тогда для вычисления их воздействия на основное состояние $F = 1$ можно использовать гамильтониан (21). Если ось квантования связать с направлением магнитного поля z , то характеристическое уравнение матрицы (21) имеет вид

$$\lambda^3 - \lambda(12 + y^2) + 2(8 + y^2 - 3y^2t^2) = 0. \quad (33)$$

Здесь $y = 6\mu_0 g_1 H / \delta_1$, $t = \cos \theta$, где θ — угол между z и z' , а корни уравнения λ_i определяют энергию расщепившихся подуровней (ϵ_i), $\lambda_i = 6\epsilon_i / \delta_1$.

Зависимость энергии подуровней (ϵ_i, λ_i) при фиксированной величине δ_1 от магнитного поля (y) при трех значениях угла θ представлена на рис. 19. Как видно из рисунка, энергия подуровня заметно зависит не только от δ_1 , но и от угла θ . Переходы между состояниями, допускаемые законом сохранения энергии,

$$\lambda_j(t, y) - \lambda_i(t, y) = \frac{6\hbar\omega}{\delta_1} = x \quad (34)$$

могут происходить при магнитных полях, различающихся на значительную величину.

В случае относительной малости случайных полей $|y| \gg 1$, актуальном для определения g -фактора, выражения для λ_i (см. Приложение 2) можно упростить и для переходов $\Delta m_F = \pm 1$ закон сохранения (34) примет вид

$$y \pm 3(1 - 3t^2) \approx x, \quad (35)$$

где $0 \leq t^2 \leq 1$. Это значит, что переходы идут для ряда y , то есть h , соответствующих различным θ . Диапазон допустимых значений H , полученный из (35), для каждой из линий сверхтонкого расщепления составляет

$$\frac{\hbar\omega}{\mu_0 g_1} - \frac{\alpha' m_I}{\mu_0 g_1} - \frac{\Delta_1 H}{2} \leq H \leq \frac{\hbar\omega}{\mu_0 g_1} - \frac{\alpha' m_I}{\mu_0 g_1} + \frac{\Delta_1 H}{2},$$

$$\Delta_1 H = 2|\delta_1| / \mu_0 g_1. \quad (36)$$

Линии переходов с $\Delta m_F = \pm 2$ значительно уже, что обусловлено одинаковым (с точностью до членов порядка y^0) влиянием случайного поля на состояния с $m_F = 1$ и $m_F = -1$ при $|y| \gg 1$. Поэтому для определения диапазона магнитных полей, в которых будут наблюдаться переходы, необходимо вычислить λ_i с точностью до членов порядка y^{-1} . Это приводит к следующему условию резонанса

$$2y + \frac{12 - 3(3t^2 - 1)^2}{y} \approx x, \quad (37)$$

откуда можно получить, что допустимые для перехода значения H для каждой линии сверхтонкого расщепления лежат в интервале

$$\frac{\hbar\omega}{\mu_0 g_1} - \frac{\alpha' m_I}{\mu_0 g_1} - \Delta_2 H \leq H \leq \frac{\hbar\omega}{\mu_0 g_1} - \frac{\alpha' m_I}{\mu_0 g_1},$$

$$\Delta_2 H = \delta_1^2 / (3\mu_0 g_1 \hbar\omega). \quad (38)$$

Из (36) и (38) следует, что уширение линий ЭПР для $\Delta m_F = \pm 1$, будет намного больше, чем для $\Delta m_F = \pm 2$. Кроме того, как видно из (38), резонанс с $\Delta m_F = \pm 2$ оказывается сдвинутым в сторону меньших магнитных полей, что соответствует увеличению эффективного g -фактора. Его величина g^* оказывается равной

$$g^* \approx 2g_1 \left(1 + \frac{\Delta_2 H}{H_2} \right),$$

где H_2 — положение пика полосы поглощения для соответствующих переходов. Оценка g^* при $|\delta_1| = 9 \mu eV$, расчетном положении пика переходов $H_2 \approx 1.2 kG$ и $g_1 = 2.77$ дает $g^* \approx 5.7$, что хорошо согласуется с величиной, полученной экспериментально [15].

Отсутствие заметного сигнала ЭПР от переходов с $\Delta m_F = \pm 1$ в Mn_{Ga}^0 в образцах, исследовавшихся в работах [37,38], по-видимому, связано с существованием в них больших расщеплений в случайных полях и деформациях.

Следует также отметить, что в образцах p - $GaAs:Mn$ помимо сигналов ЭПР, вызванных центрами Mn_{Ga}^0 , наблюдались также и другие резонансы, поведение которых отличалось некоторыми особенностями. В частности, в работе [44] наблюдался ЭПР, соответствующий значениям g -фактора ~ 4.07 и ~ 2 , который связывался с междоузельным атомом Mn , взаимодействующим с нейтральным и заряженным акцептором, создаваемым Mn_{Ga} . Присутствие этих добавочных сигналов видны и в спектрах ЭПР образцов, исследовавшихся в работах [15,31].

7. Влияние магнитного поля на спектр возбуждения Mn_{Ga}^0

Смешивание обменным взаимодействием состояний с различными проекциями полного момента дырки m_J в каждом из расщепившихся в магнитном поле подуровней основного состояния $F = 1$ приводит к увеличению числа компонент зеемановского расщепления линий поглощения, вызванных возбуждением акцептора при низкой температуре.

Исследования расщепления в магнитном поле линии поглощения Mn_{Ga}^0 , связанной с переходом локализованной дырки, в мелкое возбужденное состояние $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ (рис. 7) при температуре 1.9 K были выполнены в работе [28] (рис. 20). Полученные зависимости сопоставлялись с расчетом, описывающим зеемановское расщепление этого состояния с помощью гамильтониана [45]

$$\hat{H}_{Zeeman}^{\Gamma_8} = \mu_0 \{ g'_1 \mathbf{H} \cdot \mathbf{J} + g'_2 (H_x J_x^3 + H_y J_y^3 + H_z J_z^3) \}, \quad (39)$$

где \mathbf{J} и J_i — матрицы полного момента дырки, равного $3/2$ в Γ_8 состоянии, и его проекции, g'_1 и g'_2 — параметры, описывающие изотропное и анизотропное расщепление. Это выражение в отличие от сферического приближения учитывает кубическую симметрию

кристаллического поля, в котором находится примесный атом. Пренебрегая, как и ранее (см. раздел 3) обменным взаимодействием локализованной дырки в возбужденном состоянии с $3d^5$ -электронами и учитывая, что их состояние ($S_d = 5/2$) в магнитном поле расщепляется изотропно, можно записать полный гамильтониан возбужденного состояния в магнитном поле в виде

$$H_{Zeeman} = \mu_0 g_e (\mathbf{S}_d \mathbf{H}) + \mu_0 \{ g'_1 \mathbf{H} \cdot \mathbf{J} + g'_2 (H_x J_x^3 + H_y J_y^3 + H_z J_z^3) \}. \quad (40)$$

Кубическая симметрия дефекта, приводящая к возникновению в гамильтониане слагаемых, содержащих g'_2 , обуславливает зависимость расщепления уровней от ориентации магнитного поля и смешивание состояний, отвечающих различным проекциям момента дырки [46,47]. В рассматриваемом случае состояния $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ к состоянию дырки с проекцией полного момента $\pm 3/2$ происходит подмешивание состояния с проекцией $\mp 5/2$ [47].

При расчете в (40) использовались значения $g'_1 = -3.15$, $g'_2 = 1.57$, соответствующие возбужденному $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ состоянию дырки, связанной на мелком акцепторе C в $GaAs$ [48].

Расщепление основного состояния также описывалось с учетом кубической симметрии дефекта

$$\hat{H} = -A(\mathbf{J} \cdot \mathbf{S}_d) + \mu_0 g_e (\mathbf{S}_d \mathbf{H}) + \mu_0 \{ g'_{10} \mathbf{H} \cdot \mathbf{J} + g'_{20} (H_x J_x^3 + H_y J_y^3 + H_z J_z^3) \}, \quad (41)$$

где g'_{10} и g'_{20} принималась равными соответствующим параметрам основного состояния мелкого акцепторного центра Sn в $GaAs$: (соответственно 0.78 и 0.07), поскольку эти величины дали хорошее согласие с величиной g -фактора основного состояния Mn_{Ga}^0 , определенной из ЭПР [15] и величиной, полученной из сферического приближения (см. таблицу).

Так как температура измерений была низка, а магнитные поля превышали 1.5 T, из трех расщепившихся состояний с $F = 1$ при анализе эффекта Зеемана в качестве начального состояния рассматривалось только состояние с $m_F = -1$.

Начальное и возбужденные состояния в магнитном поле определялись путем численного решения уравнений Шредингера с гамильтонианами (40) и (41), в качестве базисных волновых функций, как и при анализе данных других экспериментов (предыдущие разделы), использовались произведения волновых функций $3d^5$ -электронов $\Psi_{m_s}^S$ и дырки в основном и возбужденном Γ_8 -состоянии $\Psi_{m_J}^J$. Рассматривались переходы с $\Delta m_J = \pm 1, 0$ при сохранении проекции спина d -электронов.

Результаты этого расчета также показаны на рис. 20.

Для основного состояния дырки обменное расщепление превосходит расщепление в магнитном поле, так что

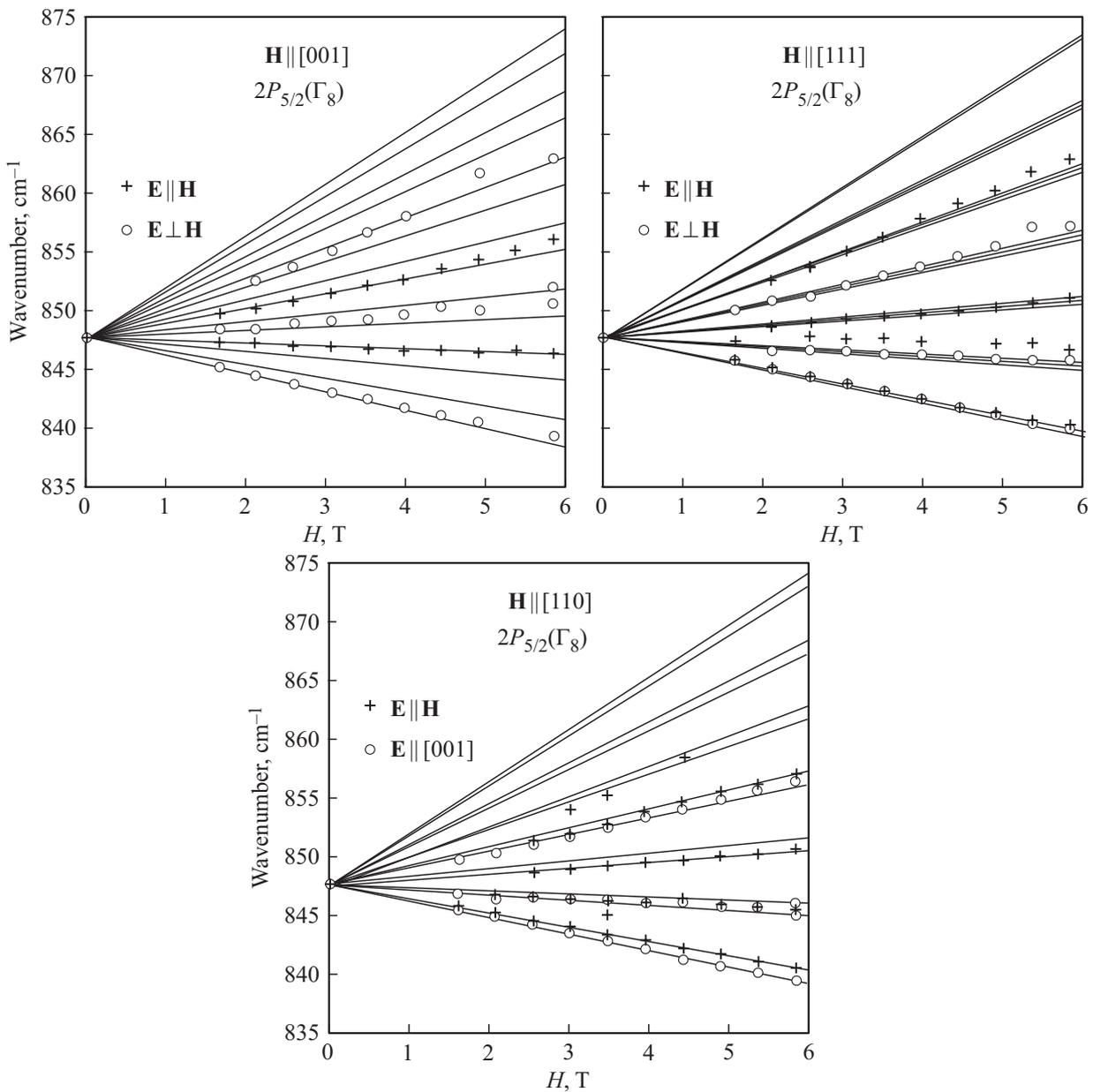


Рис. 20. Зеемановское расщепление $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ линии поглощения нейтрального акцепторного центра Mn_{Ga}^0 в GaAs при различных направлениях магнитного поля и $T = 1.9$ К [28]. Линии — расчет, точки — данные эксперимента при различных ориентациях электрического вектора поглощаемого света относительно направления магнитного поля.

для начального состояния в экспериментах по зеемановскому расщеплению $F = 1$ и поэтому анизотропия расщепления начального состояния в магнитном поле отсутствует. Следствием кубической симметрии дефекта в этом случае является небольшое добавочное смешивание состояний (см. ниже) и изменение g -фактора его основного состояния по сравнению с выражением (15)

$$g_1 = \frac{7}{4} g_e - \frac{3}{4} g'_{10} - \frac{123}{80} g'_{20},$$

где $g_e = 2.003$. Однако полученная таким образом величина g -фактора основного состояния, близка к величине 2.75, следующей из сферического приближения.

Четыре высокоэнергетические компоненты расщепления были получены в расчете (рис. 20) при учете кубической симметрии дефекта, подмешивающей в волновые функции состояния с $F = 1$, $m_F = -1$ члены, отвечающие проекции полного спина $3d$ -электронов $m_S = 3/2$. Отсутствие этих компонент в эксперимента было объяснено относительно малой долей этих членов в полной волновой функции состояния и вызванной этим слабостью соответствующих линий поглощения [28]. В сферическом приближении состояние с $F = 1$, $m_F = 1$ вообще не содержит членов с проекцией спина $3d$ -электронов Mn $m_S = 3/2$ и $m_S = 5/2$ (см. Приложение 1).

Если принять во внимание, что и другие линии поглощения могут оказаться слабыми или не разрешаться в эксперименте, можно считать, что расчетные зависимости удовлетворительно согласуются с данными эксперимента. При этом учет кубической симметрии центра при описании возбужденного состояния привел к существенному улучшению этого согласия, поскольку объяснил небольшую анизотропию и появление добавочных компонент в спектрах зеемановского расщепления.

Анализ возможных компонент зеемановского расщепления для переходов с $\Delta m_J = \pm 1, 0$, проведенный нами при использовании выражений для g -факторов, приведенных в работе [46], и указанных выше значениях параметров g'_1 и g'_2 для возбужденного состояния, в случаях направления магнитного поля вдоль оси [001] или [111] дали зависимости, близкие к рассчитанным в работе [28].

В целом результаты, полученные в [28], демонстрируют, что мелкое возбужденное состояние $2P_{5/2}(\Gamma_8)$ нейтрального акцептора Mn_{Ga}^0 подобно соответствующему состоянию мелкого акцептора. Обменное взаимодействие дырки в этом состоянии с $3d$ -электронами практически отсутствует. Для всех направлений магнитного поля максимальное расщепление линий поглощения при возбуждении дырки в это состояние определяется расщеплением энергии состояний $3d^5$ -электронов, соответствующих проекциям их полного спина $m_S = -5/2$ и $m_S = +1/2$.

8. Циркулярная поляризация фотолюминесценции, вызванной рекомбинацией электрона с дыркой на центре Mn_{Ga} в магнитном поле

Степень циркулярной поляризации фотолюминесценции определяется выражением

$$\rho_C = \frac{I_+ - I_-}{I_+ + I_-}, \quad (42)$$

где I_+ и I_- — интенсивности фотолюминесценции, поляризованной по правому и левому кругу (имеющей σ^+ и σ^- поляризацию).

Рассмотрим вначале циркулярную поляризацию в пренебрежении влияния случайных полей. Если температура низкая, то система Mn_{Ga} + дырка находится в основном состоянии $F = 1$, которое в магнитном поле расщепляется на 3 подуровня с $m_F = -1, 0, +1$. Энергетическое расстояние между этими подуровнями в первом порядке теории возмущений составляет $\mu_0 g_1 H$ (см. выражение (14)), а волновые функции, соответствующие им состояний $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, +1\rangle$ приведены в Приложении 1. Пусть излучение связано с рекомбинацией электронов со дна зоны проводимости с дырками в этих состояниях, направление наблюдения фотолюминесценции совпадает с направлением магнитного поля,

распределение дырок по подуровням центра больцмановское и внешнее магнитное поле не ориентирует электроны. Тогда выражение для степени интегральной циркулярной поляризации фотолюминесценции имеет вид [19]

$$\rho_C^0 = \frac{5}{7} \frac{\text{sh } x}{\frac{3}{7} + \text{ch } x}, \quad x = \frac{\mu_0 g_1 H}{kT} \quad (43)$$

и предельная величина ρ_C^0 при $x \rightarrow \infty$ ($\rho_C^0(\infty)$) составляет $5/7$. В тех же предположениях для мелкого акцептора $\rho_C^0(\infty) = -1$. Разница между этими двумя случаями обусловлена смешиванием волновых функций дырки и их антиферромагнитным выстраиванием ($F = 1$) за счет обменного взаимодействия, существующего в центре Mn .

Эти особенности поляризации могут сохраняться и в условиях излучения, обусловленного рекомбинацией горячих электронов с дырками, локализованными на этом центре. Однако при этом циркулярная поляризация начинает зависеть от энергии электронов и анизотропии их распределения [49] и для ее вычисления необходимо знать явный вид волновых функций дырки $\Psi_{m_j}^J$, входящих в выражения для $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, +1\rangle$ (Приложение 1). Оценки ρ_C могут быть сделаны так же, как в работах [9,50], в сферическом двухзонном приближении. Последнее означает, что угловые зависимости $\Psi_{m_j}^J$ аналогичны таковым для волновой функции дырки, связанной на мелком акцепторе или на глубоком центре с потенциалом нулевого радиуса. В условиях эксперимента [9] кинетическая энергия рекомбинирующего электрона значительно превышает энергию связи дырки, и ρ_C зависит только от анизотропии распределения электронов по импульсам, описываемой параметром α [9,50,51]. Предполагая по-прежнему, что рекомбинирующие горячие электроны не ориентируются в магнитном поле, можно получить следующее выражение для ρ_C [19]

$$\rho_C = \frac{63(5 - \alpha)}{707 - 43\alpha} \frac{2 \text{sh } x}{2 \text{ch } x + (686 - 19\alpha)/(707 - 43\alpha)}. \quad (44)$$

В слабых полях ($x \ll 1$)

$$\rho_C = \frac{6}{5} \frac{5 - \alpha}{209 - \alpha} x. \quad (44a)$$

Поскольку $\alpha \ll 1$ [49], ρ_C согласно (44) положительно, что согласуется с экспериментом и обусловлено антиферромагнитным обменным взаимодействием (в рассматриваемой модели $A < 0$).

При оптической ориентации рекомбинирующих электронов, характеризуемой их средним спином s и коэффициентом корреляции между спином и импульсом β [49,51], для величины ρ_C было получено следующее выражение [19]

$$\rho_C = \frac{126(5 - \alpha) \text{sh } x - 322(2s + \beta) - 728(2s + \beta) \text{ch } x}{2(707 - 43\alpha) \text{ch } x + 686 - 19\alpha - 504(2s + \beta) \text{sh } x}. \quad (45)$$

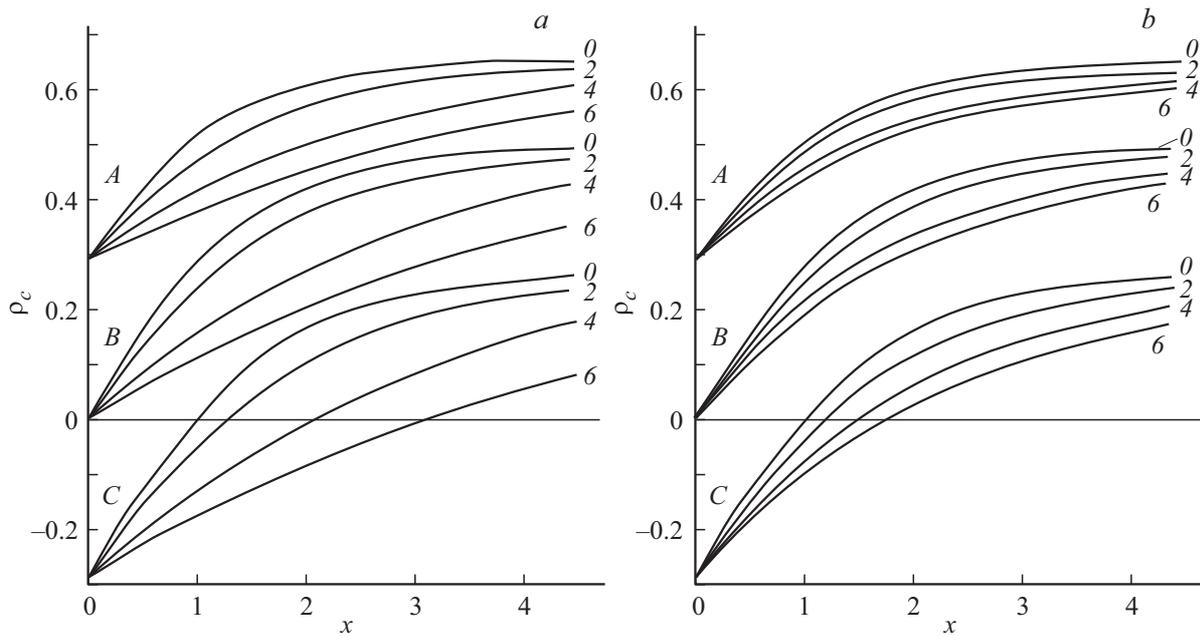


Рис. 21. Влияние случайных полей на зависимость степени циркулярной поляризации горячей фотолуминесценции Mn_{Ga} в GaAs от магнитного поля ($x = \mu_0 g_1 H/kT$) (расчет по формулам Приложения 2) [19]. *a* — $\delta_1 > 0$, *b* — $\delta_1 < 0$. *A* и *C* — σ^+ - и σ^- -возбуждение ($2s + \beta = \mp 0.6$, $\beta = \mp 0.4$), *B* — π -возбуждение ($2s + \beta = 0$, $\beta = 0$). Цифры около кривых означают величину δ_1/kT . $\alpha = -1$.

При экспериментальном исследовании циркулярной поляризации горячей фотолуминесценции в магнитном поле [9], кроме ρ_C , определялась и величина χ , равная

$$\chi = \frac{\rho_{\sigma^+} - \rho_{\sigma^-}}{2} - \eta \frac{\rho_{\sigma^+} + \rho_{\sigma^-}}{2}. \quad (46)$$

Здесь ρ_{σ^+} и ρ_{σ^-} представляют собой ρ_C при σ^+ - и σ^- -возбуждении, а η — параметр спин-зависящей комбинации

$$\eta = \frac{I_{\sigma^+} - I_{\sigma^-}}{I_{\sigma^+} + I_{\sigma^-}}, \quad (47)$$

где I_{σ^+} и I_{σ^-} — полные интенсивности фотолуминесценции при σ^+ - и σ^- -возбуждении. Как показывают вычисления, в рассматриваемой модели

$$\chi = -(2s + \beta) \frac{322 + 728 \operatorname{ch} x}{686 - 19\alpha + 2(707 - 43\alpha) \operatorname{ch} x} \quad (48)$$

и весьма слабо зависит от x при всех возможных значениях α ($-1 \leq \alpha \leq 1$).

В рамках настоящей модели, применяя, как и при вычислении магнитной восприимчивости и спектров ЭПР, сферическое приближение, можно оценить и влияние на ρ_C случайных полей, при которых расщепление исходного уровня дырки $|\delta|$ меньше $|A|$. Поскольку в экспериментах [9] $kT \ll |A|$, учитывать следует только основной уровень $F = 1$ и использовать результаты, описанные в разделах 4 и 6.

При произвольном соотношении между δ_1 и $\mu_0 g_1 H$ волновые функции, отвечающие i -тому подуровню расщепившегося основного состояния, являются линейной

комбинацией волновых функций этого состояния с различными проекциями полного момента на ось z $|1, -1\rangle$, $|1, 0\rangle$ и $|1, +1\rangle$ с коэффициентами $C_{1,0}^i$, $C_{1,1}^i$ и $C_{1,-1}^i$, зависящими от y и t

$$\Psi_i = C_{1,0}^i |1, 0\rangle + C_{1,1}^i |1, 1\rangle + C_{1,-1}^i |1, -1\rangle. \quad (49)$$

Соотношения, связывающие коэффициенты $C_{1,0}^i$, $C_{1,1}^i$ и $C_{1,-1}^i$ и корни характеристического уравнения (33) λ_i с y и t , приведены в Приложении 2.

Рассматривая излучательный захват горячих электронов системой Mn_{Ga} + дырка в состояниях, описываемых волновыми функциями (49), можно получить выражения для вычисления ρ_C (Приложение 2). Результаты численных расчетов при возбуждении горячих электронов циркулярно поляризованным или линейно поляризованным светом (соответственно σ^- - и π -возбуждения) показаны на рис. 21. Видно, что учет случайных расщеплений уменьшает ρ_C при любом типе возбуждения.

Для количественного сопоставления расчета с экспериментом [9] в согласии с [9,51] было принято, что $\alpha = -1$. Тогда, как показывают расчеты [19], аппроксимация экспериментальных данных достигается как при $\delta_1 = 0$ (выражения (44) и (45)), так и при $\delta_1 \neq 0$ (формулы в Приложении 2) (рис. 22). При этом величины $2s + \beta$ и β в случаях σ^+ - и σ^- -возбуждений, независимо от величины δ_1 оказались равными ∓ 0.6 и ∓ 0.4 соответственно. Выбор величины δ_1 определял только значение g_1 , т.е. величину g_h при постоянном g_e .

Зависимости g_1 и g_h , обеспечивающих наилучшее согласие расчета с экспериментальными кривыми $\rho_C(H)$,

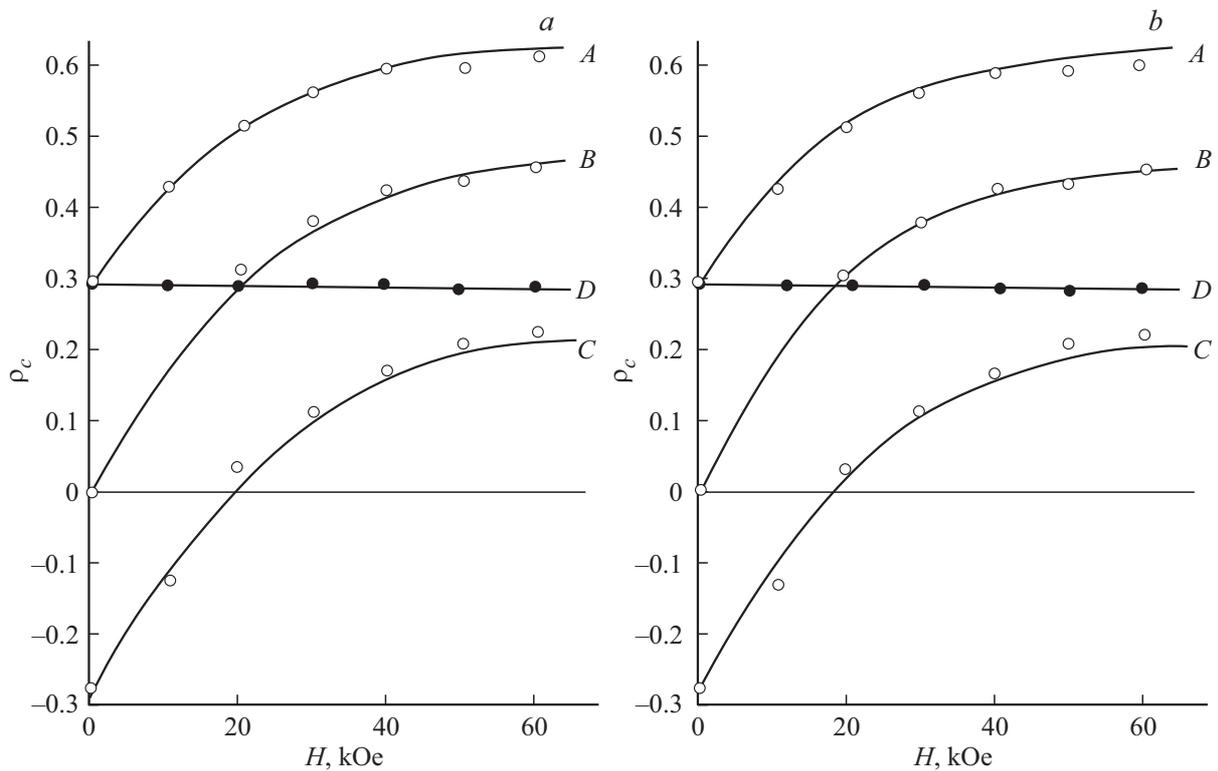


Рис. 22. Сопоставление экспериментальных зависимостей $\rho_c(H)$ и $\chi(H)$ с расчетом, учитывающим случайные поля при $g_1 = 2.75$ ($g_h = -1$), $\alpha = -1$. Точки — эксперимент [9], линии — расчет при $\delta_1 = 0.6$ meV (a) и $\delta_1 = -0.9$ meV (b). A и C — $\rho_c(H)$ при $2s + \beta = \mp 0.6$, $\beta = \mp 0.4$ (соответственно для σ^+ - и σ^- -возбуждений). B — $\rho_c(H)$ при $2s + \beta = 0$, $\beta = 0$ (для π -возбуждения). D — $\chi(H)$ при $2s + \beta = \mp 0.6$, $\beta = \mp 0.4$.

показаны на рис. 23. Видно, что g_1 и g_h близки к полученным из других экспериментов на образцах с небольшой величиной случайных расщеплений (см. раздел 6), если в образцах [9] $\delta_1 \approx 0, 6$ meV или $\delta_1 \approx -0.9$ meV.

Указанные значения δ_1 соответствуют исходному расщеплению состояний дырки в случайных полях $\delta = 4-6$ meV, что сравнимо с расщеплением под влиянием обменного взаимодействия. В связи с этим применение теории возмущений к описанию экспериментальных

данных, полученных на исследовавшихся в [9] образцах, не вполне корректно. Однако использование теории возмущений для противоположного предельного случая $\delta \gg |A|$, рассмотренного при анализе приведенных экспериментальных данных в работе [9], означало бы, что расщепление в случайных полях заметно превышает 10 meV. Такая величина расщеплений в относительно слабо легированных образцах GaAs представляется маловероятной и противоречит наблюдению в спектрах фотолюминесценции Mn_{Ga} отдельных пиков фоновых повторений.

9. Поглощение ультразвука, связанное с центрами Mn_{Ga}^0

Расщепление уровней основного состояния Mn_{Ga}^0 в случайных электрических или деформационных полях приводит к резонансному поглощению ультразвука в кристаллах p -GaAs:Mn при низких температурах. Коэффициент этого поглощения α для продольной звуковой волны с частотой 390–2000 МГц, распространяющейся в направлении [111], измерялся в работе [36] (рис. 24).

Полуколичественный анализ экспериментальных результатов в простой двухуровневой модели [52], не учитывающей особенностей, вводимых обменным вза-

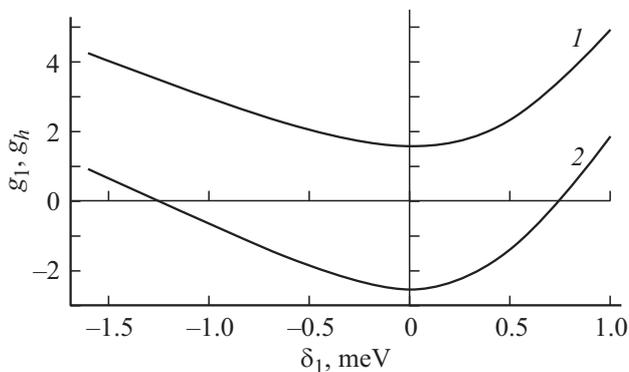


Рис. 23. Зависимость величин g -факторов g_1 (1) и g_h (2), обеспечивающих согласие расчетов с экспериментом [9], от величины случайного расщепления δ_1 .

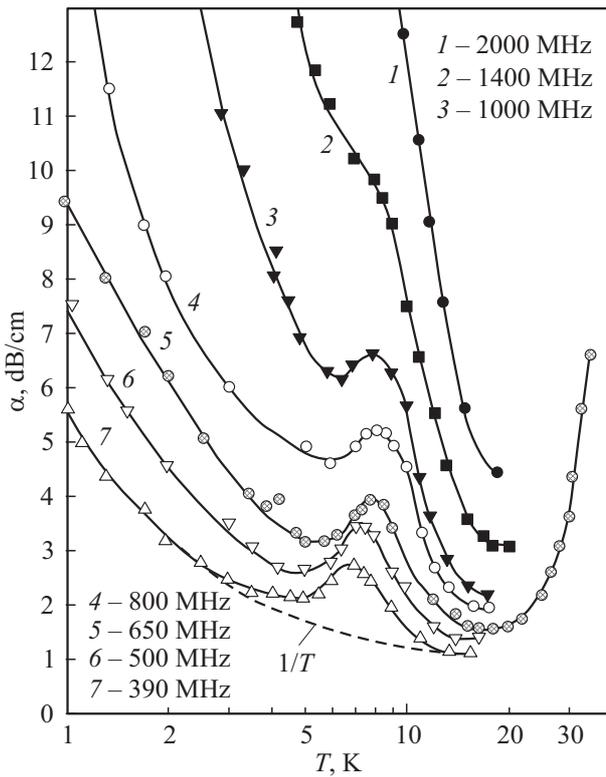


Рис. 24. Температурная зависимость коэффициента поглощения продольной ультразвуковой волны различной частоты [36].

имодствием локализованной дырки и $3d$ -электронов, показал, что при температурах ниже 3 К поглощение ультразвука определяется резонансным механизмом, а релаксационное поглощение, приводящее к появлению максимума на зависимости $\alpha(T)$ дает заметный вклад при 4–10 К (рис. 24) [36].

Рассмотрение экспериментальных результатов [36] в рамках модели центра Mn_{Ga}^0 , учитывающей обменное взаимодействие связанной дырки с $3d$ -электронами, было предпринято в [53]. Как и в работе [36], рассматривалось резонансное и релаксационное поглощение звука. Как обычно [36,53], взаимодействие ультразвуковой волны с дырками, связанными на центрах Mn, считалось деформационным. Плотность потока энергии такой волны определяется выражением

$$\Phi = \frac{9}{2} \rho S^3 (\varepsilon_{xy}^0)^2, \quad (50)$$

где ρ — плотность кристалла, S — скорость ультразвука, ε_{xy}^0 — амплитуда компоненты тензора деформаций, создаваемых продольной [111] ультразвуковой волной.

В соответствии с моделью центра (см. выражение (21b) при $H = 0$) основное состояние $F = 1$ расщепляется на два подуровня, соответствующих проекции $m_F = 0$ и $m_F = \pm 1$ на ось случайного поля (величина расщепления δ_1). В силу малости частоты ультразвука Ω ($\hbar\Omega \ll |A|$) резонансные переходы могут

происходить только между этими подуровнями. Волновые функции расщепившихся состояний соответствуют приведенным в Приложении 1. Тогда, действуя обычным образом [52,54], можно получить следующее выражение для коэффициента резонансного поглощения ультразвука (α_r) при переходах между расщепившимися подуровнями в приближении Больцмановского распределения центров по ним при $\delta_1 = \hbar\Omega \ll kT$ и равновероятном распределении случайных полей по углам

$$\alpha_r = 2\pi\hbar \frac{4}{135} \left(\frac{3}{20}\right)^2 \frac{d_T^2 \Omega^2 N_{Mn}(|\delta_1| = \hbar\Omega)}{\rho S^3 kT}, \quad (51)$$

где $N(\delta_1)$ — плотность центров Mn (на единицу энергии) с расщеплением подуровней δ_1 , d_T — исходная константа деформационного потенциала связанной дырки при деформации вдоль оси [111], ρ — плотность кристалла, S — скорость распространения звуковой волны в кристалле. Множитель $4/135$ в (51) обусловлен усреднением по различным направлениям случайного поля и учитывает число возможных переходов между подуровнями, а множитель $(3/20)^2$ связан с подавлением обменным взаимодействием взаимодействия дырки с деформацией, в результате чего эффективная константа деформационного потенциала для состояния с $F = 1$ уменьшается по сравнению с исходной константой и составляет $0.15d_T$.

Для количественного сравнения полученных выражений с экспериментом при $T \leq 3$ К необходимо учесть, что измеренный коэффициент поглощения (рис. 24) содержит независимый от температуры вклад α_0 , величина которого ~ 0.7 dB/cm может быть определена из экспериментальной зависимости $\alpha = f(1/T)$ при $T \leq 3$ К, когда коэффициент поглощения определяется резонансным механизмом и пропорционален Ω^2/T .

Результаты аппроксимации измеренных зависимостей коэффициента поглощения от температуры расчетом $\alpha = \alpha_0 + \alpha_r$ представлены на рис. 25 и демонстрируют хорошее согласие расчета и эксперимента. Величина деформационного потенциала при этом соответствуют данным пьезоспектроскопических экспериментов.

Отметим, что полученные при аппроксимации значения $N_{Mn}(\delta_1)$ при наименьших исследованных частотах ультразвука составляют примерно $10^{23} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$, а затем начинают уменьшаться по абсолютной величине. Если предположить, что эта тенденция в дальнейшем сохранится, то при полной концентрации Mn в исследованном образце $1.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ величина максимального расщепления подуровней $Mn\delta_{1\max}$ будет заметно превышать $20 \mu\text{eV}$. В этом случае (см. раздел 6) значение g -фактора, измеренного для переходов с $\Delta m_F = \pm 2$ в спектрах ЭПР на нейтральном акцепторе Mn в образце GaAs, исследованном в [36], должно существенно превышать величину 5.72, полученную в [15] на образце, в котором по оценкам $|\delta_1| = 9 \mu\text{eV}$ (раздел 6). Это и наблюдалось в работе [36], обнаружившей в исследованном образце сигнал ЭПР с g -фактором 6.4.

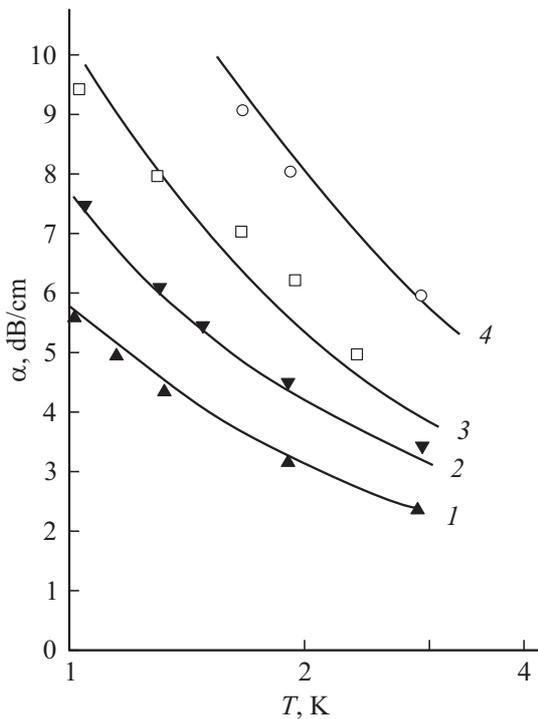


Рис. 25. Сопоставление расчетов $\alpha_0 + \alpha_r$ с данными эксперимента [36] при $T < 3$ К. Точки — эксперимент, частота ультразвука, МГц: 1 — 390, 2 — 500, 3 — 650, 4 — 800. Кривые — расчет при следующих значениях параметров: $d_T = -5.5$ eV, $S = 5.4 \cdot 10^5$ см/с, $N_{Mn}(\delta_1) \cdot 10^{23}$ см $^{-3}$ eV $^{-1}$: 1 — 1.05, 2 — 0.9, 3 — 0.7, 4 — 0.75.

Релаксационное поглощение ультразвука связано с отставанием от равновесного, заполнения расщепленных подуровней основного состояния центра, изменяющих свое энергетическое положение в деформационном поле звуковой волны. Как показывает анализ [20,53], при условии $\delta_1, \hbar\Omega \ll kT$ для центров Mn_{Ga}^0 коэффициент релаксационного поглощения продольной [111] звуковой волны (α_r) определяется выражением

$$\alpha_r = \frac{2d_T^2}{1125\rho S^3 kT} \int N_{Mn}(\delta_1) \frac{\Omega^2 \tau}{1 + \Omega^2 \tau^2} d\delta_1, \quad (52)$$

где τ — характеристическое время релаксации заселенности подуровней. Величина τ определяется механизмами релаксации.

Простые однофононные процессы для типичных в эксперименте малых значений δ_1 и температур ~ 6 К дают большое время релаксации ($\tau \sim 10^{-6}$ с), так как вероятности переходов малы вследствие малости плотности фононных состояний при небольшой энергии.

Механизмами более быстрой релаксации заселенности подуровней могут быть двухфононные рамановские или орбаховские процессы [36,54].

Если рамановский процесс происходит только с участием тех же расщепившихся состояний локализованной дырки [55], энергетическое расстояние между которыми намного меньше энергии фононов, участвующих

в переходах, [55] то $\tau_{Ram}^{-1} \sim T^5$. В этом случае при переходах между подуровнями с $m_F = \pm 1$ и $m_F = 0$, можно получить следующее выражение для времени релаксации [53]

$$\tau_{Ram}^{-1} = \frac{(kT)^5 \pi d_T^2}{\hbar^7 \rho^2 10^6} \times \left[\frac{4}{5S_{\parallel}^{10}} (12b_T^2 + d_T^2) + \frac{15}{4S_{\perp}^{10}} \left(b_T^2 + \frac{1}{3} d_T^2 \right) \right] f'(T), \quad (53)$$

где b_T — исходная константа деформационного потенциала для деформации вдоль оси [100], S_{\parallel} и S_{\perp} — скорости продольных и поперечных фононов, $f'(T)$ — формфактор, учитывающий неоднородность вызванной фононами деформации в пределах характерного размера волновой функции локализованной на центре дырки. При низких температурах для центра с энергией ионизации 0.1 eV $f'(T) \approx 1$ [53].

В случае процессов Орбаха–Аминова релаксация заселенности расщепившихся подуровней основного состояния происходит при резонансных переходах с участием возбужденного состояния, энергия которого на величину Δ выше энергии основного состояния и лежит в пределах дебаевского спектра фононов [56]. Если при этом $\Delta \gg kT$, то

$$\tau_{Orb}^{-1} \sim \exp\left(-\frac{\Delta}{kT}\right). \quad (54)$$

Природа состояния, через которое происходят релаксационные переходы, может быть чисто электронной или связанной с локальными колебаниями центра [55]. От этого зависит значение предэкспоненциального множителя в соотношении (54).

Так как в анализируемых экспериментах $|\delta_1| \ll |A|, kT$, времена релаксации, определяемые рамановским и орбаховским процессами, слабо зависят от δ_1 (формулы (53) и (54) получены в этом приближении). Это позволяет, проинтегрировав (52), получить

$$\alpha_r = \frac{2d_T^2}{1125\rho S^3 kT} N_{Mn}^* \frac{\Omega^2 \tau}{1 + \Omega^2 \tau^2}, \quad (55)$$

где N_{Mn}^* может несколько отличаться от реальной концентрации Mn из-за указанной зависимости τ от δ_1 . Подобное соотношение между α_r и τ , приводящее к максимуму α_r при $\Omega\tau = 1$, позволило в определить величину τ при разных температурах. Зависимость $2\pi\tau = 2\pi/\Omega$ от $1/T$ [36] показана на рис. 26.

В исследованном узком диапазоне температур 7–10 К эта зависимость может быть одинаково хорошо описана как соотношением $\tau^{-1} \sim \exp(-\frac{\Delta}{kT})$ при $\Delta \approx 3$ meV [36], так и соотношением $\tau^{-1} \sim T^5$ [53] при $f'(T) = \text{const}$. Однако минимальная величина времени релаксации,

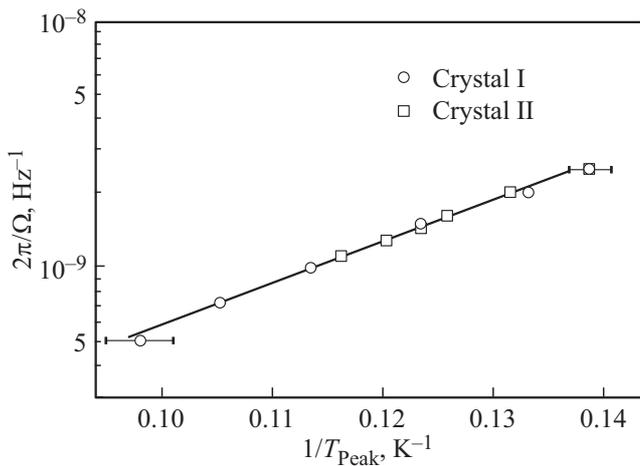


Рис. 26. Зависимость температуры, при которой имеет место пик релаксационного поглощения ультразвука, от частоты [36].

полученная из выражения (53) при минимальных значениях скоростей фононов и $f'(T) = 1$, примерно в 3 раза превышает величины, определенные из эксперимента [36]. Это показывает, что рамановский процесс релаксации не является доминирующим в диапазоне температур 7–10 К.

С другой стороны, экспоненциальная зависимость времени релаксации от температуры (54) при $\Delta \approx 3$ meV наблюдалась и в более широком диапазоне температур 3.5–8.3 К, как было установлено из измерений температурного изменения ширины линии ЭПР, соответствующей переходам между состояниями с $m_F = +1$ и $m_F = -1$ [57]. Это позволило в [57], как и в [36], заключить, что релаксация заселенности происходит в основном за счет процессов Орбаха.

Поскольку расстояние до ближайшего электронного состояния центра Mn_{Ga}^0 , равное $2A$, заметно выше, чем 3 meV, можно предположить, что состояние, через которое происходит релаксация, образовано в результате взаимодействия дырки с локальными колебаниями центра [55]. Предположение о существовании таких колебаний с энергией ~ 3 meV не противоречит виду спектра низкотемпературной фотолюминесценции при рекомбинации электрона с дыркой, связанной на Mn (рис. 1). Смешивание продольного и поперечного оптических колебаний, приводящее к величине энергии активации ~ 3 meV [57], представляется маловероятным, поскольку при низких температурах эти колебания, имеющие энергию фононов ~ 35 meV, не возбуждаются.

10. Эффект Холла в p -GaAs: Mn

Отличия акцепторного центра Mn от обычного мелкого акцептора в GaAs, связанные с ненулевым спином $3d$ -электронов и обменным взаимодействием, должны приводить и к изменению величины фактора вырождения G для этого центра по сравнению с фактором

вырождения мелкого акцептора ($G = 4$), поскольку кратности вырождения основного состояния Mn_{Ga}^0 и Mn_{Ga}^- изменяются. Кроме того, согласно общим представлениям [58] в условиях существования возбужденных состояний их вклад в эффективную кратность вырождения нейтрального акцептора G^0 равен произведению кратности вырождения каждого из этих состояний на больцманновский множитель. В силу этого возникшие в результате обменного взаимодействия возбужденные состояния, энергия которых на несколько meV превышает энергию основного состояния, также должны учитываться в области температур, соответствующей температурному изменению степени заполнения акцептора дырками. Кратность вырождения акцептора Mn, захватившего электрон, G^- определяется полным спином d -оболочки $S_d = 5/2$ и равна 6. Поэтому в рассматриваемой модели центра

$$G = \frac{G^0}{G^-} = \frac{3 + 5 \exp(-2|A|/kT) + 7 \exp(-5|A|/kT) + 9 \exp(-9|A|/kT)}{6}, \quad (56)$$

т.е. зависит от температуры и изменяется от 0.5 при $T \rightarrow 0$ до 4 при $T \rightarrow \infty$. Обычно это не учитывалось, и при анализе холловских измерений фактор вырождения принимался равным 4 [59–61]. Лишь в ранней работе [62] фактор вырождения подбирался эмпирически и оказался равным 2.3 ± 1 , что никак не интерпретировалось. Исследования, направленные на выяснение соответствия фактора вырождения выражению (56), были проведены в работе [63]. Измерения проводились в диапазоне температур 77–440 К на образцах с концентрацией акцепторов $(0.2-4) \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Концентрация дырок p находилась из измерений коэффициента Холла R согласно соотношению

$$p = a_r (Rqc)^{-1}, \quad (57)$$

где a_r — холловский фактор, c — скорость света.

Экспоненциальный участок зависимости $p = f(T^{-1})$ (рис. 27) при температурах ниже 200 К давал энергию активации, близкую к энергии ионизации акцепторного уровня Mn. Это означало, что при низких температурах уровень Ферми находится вблизи уровня Mn и во всем исследуемом диапазоне температур происходит опустошение этого уровня. В этом случае уравнение электронейтральности имеет вид

$$p + N_D = \frac{N_{\text{Mn}}}{1 + p \frac{G}{N_v} \exp \frac{E_{\text{Mn}}}{kT}}, \quad (58)$$

где N_D — разность концентраций мелких доноров и мелких акцепторов, N_v — эффективная плотность состояний в валентной зоне ($N_v = [2\pi m_p kT/\hbar^2]^{3/2}$, $m_p = 0.6m_e$), N_{Mn} — концентрация центров Mn, E_{Mn} — разница энергий между акцепторным уровнем Mn и потолком валентной зоны.

Аппроксимация экспериментальных данных с использованием соотношений (56)–(58) проводилась подбором величин N_D , N_{Mn} , E_{Mn} и A при минимизации

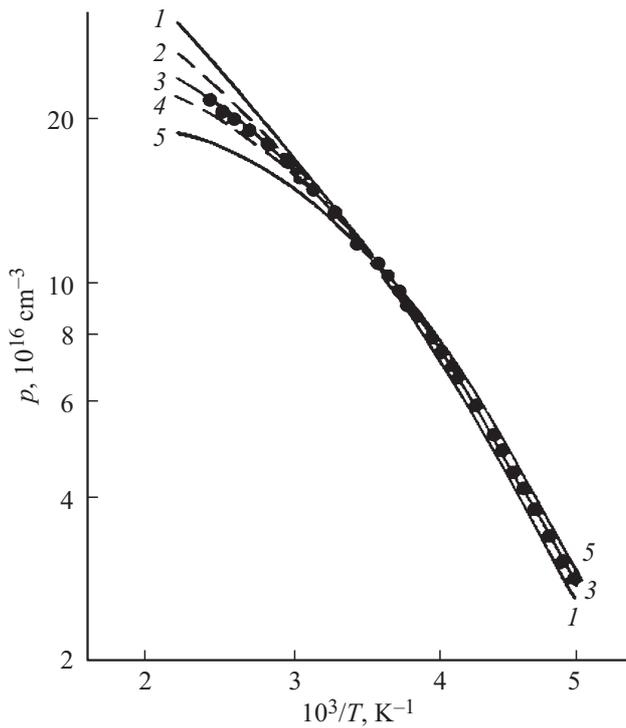


Рис. 27. Зависимость концентрации дырок от температуры для образца p -GaAs:Mn [63]. Точки — данные измерений при условии, что $a_r = 1$. Линии — расчет по (56) и (58) при следующих значениях $|A|$, meV: 1 — 0, 2 — 5, 3 — 10, 4 — 15, 5 — ∞ . Значения остальных параметров, подбираемых для наилучшей аппроксимации, N_{Mn} , 10^{17} cm^{-3} : 1 — 6.34, 2 — 5.70, 3 — 4.43, 4 — 4.26, 5 — 3.57; N_D , 10^{16} cm^{-3} : 1 — 4.39, 2 — 7.0, 3 — 11.2, 4 — 14.2, 5 — 15; E_{Mn} meV: 1 — 106.8, 2 — 113.7, 3 — 110.5, 4 — 108.0, 5 — 105.0.

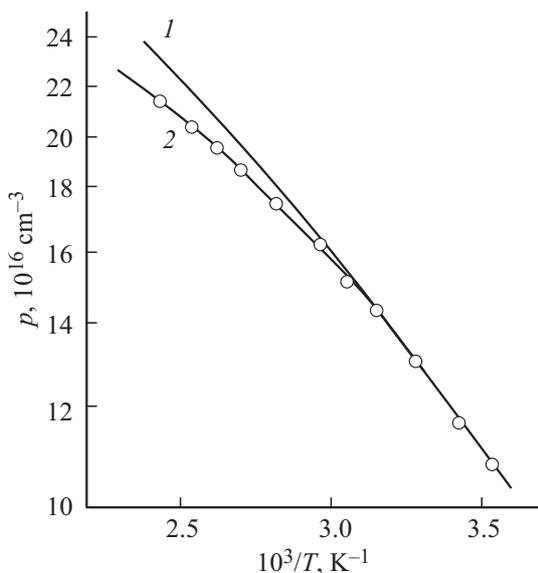


Рис. 28. Высокотемпературная часть зависимости концентрации дырок от температуры для образца p -GaAs:Mn, показанного на рис. 27 [20]. Точки — данные измерений. Линии — расчет в предположении, что a_r изменяется с температурой, как указано в тексте. 1 — $G = \text{const}$, 2 — G определяется выражением (56) при $|A| = 5 \text{ meV}$.

суммы квадратов относительных отклонений модифицированным методом Гаусса–Зейделя по программе [64].

Если, как это обычно делается, считать, что $a_r = 1$ во всем измеренном интервале температур, то оптимальное соответствие расчета и эксперимента достигалось при $|A| \approx 10 \text{ meV}$ (рис. 27). Однако расчеты показали, что существенное влияние на оптимальную величину $|A|$ оказывают предположения относительно изменения с температурой величины холловского фактора a_r во всем измеренном интервале температур.

Относительная величина магнитосопротивления в исследованных образцах оказалась очень малой (менее 1% при $T = 77 \text{ K}$ и $H = 1 \text{ T}$). Это свидетельствует о несущественной роли легких дырок в эффектах переноса [65] и позволяет считать, что a_r определяется только механизмом рассеяния тяжелых дырок. Как следует из измерений подвижности, при температурах выше 200 K преобладает рассеяние на колебаниях решетки, при котором $a_r \approx 1$ [65]. С понижением температуры наблюдается переход к рассеянию на ионах, которое должно приводить к росту a_r . Расчеты a_r из экспериментальной величины подвижности при рассмотрении рассеяния на колебаниях решетки и ионах с учетом экранирования [66] дают $a_r = 1.3\text{--}1.5$ при $T = 100 \text{ K}$. Для учета подобных изменений a_r в работе [63] предполагалось, что $a_r = 1.5$ при $T \leq 100 \text{ K}$, $a_r = 1$ при $T \geq 200 \text{ K}$ и линейно изменяется с температурой в промежутке 100–200 K. В этих условиях оптимальная величина константы обменного взаимодействия $|A|$ была равной примерно 5 meV (рис. 28).

В обоих случаях наибольшее влияние значения A на относительное изменение расчетной величины p оказалось при температурах выше 300 K и при значительных изменениях A было невелико.

Если же предполагать, что величина G -фактора не зависит от температуры, и не использовать выражение (56), а непосредственно подбирать G , то оптимальная аппроксимация экспериментальных данных достигалась при $G = 1\text{--}1.8$.

Таким образом, результаты работы [63] показывают, что фактор вырождения акцепторного центра Mn в GaAs при температурах ниже 440 K значительно меньше 4, что свидетельствует об отличии электронной структуры основного состояния этого центра от структуры мелкого акцептора. Последнее естественно может быть объяснено обменным взаимодействием локализованной на центре дырки с электронами d -оболочки Mn. При этом согласно приближенным оценкам величина константы обменного взаимодействия составляет несколько meV.

11. Волновая функция исходного основного состояния дырки, локализованной на нейтральном акцепторе Mn_{Ga}^0

Как предполагается в модели, исходное состояние локализованной дырки имеет симметрию Γ_8 и обладает

полным моментом 3/2. В рамках метода эффективной массы для мелких акцепторов в кубических полупроводниках в сферическом приближении волновая функция этой дырки представляет собой сумму произведений блоховских амплитуд X_μ на плавные огибающие $R_0(r)$ и $R_2(r)$ [23,67]

$$\begin{aligned} \Psi'_{\frac{3}{2}} &= R_0(r)Y_{00}X_{\frac{3}{2}} + \frac{1}{\sqrt{5}}R_2(r)Y_{20}X_{\frac{3}{2}} \\ &\quad - \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{21}X_{\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{22}X_{-\frac{1}{2}}, \\ \Psi'_{\frac{1}{2}} &= R_0(r)Y_{00}X_{\frac{1}{2}} - \frac{1}{\sqrt{5}}R_2(r)Y_{20}X_{\frac{1}{2}} \\ &\quad + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{2,-1}X_{\frac{3}{2}} + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{22}X_{-\frac{3}{2}}, \\ \Psi'_{-\frac{1}{2}} &= R_0(r)Y_{00}X_{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{\sqrt{5}}R_2(r)Y_{20}X_{-\frac{1}{2}} \\ &\quad + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{21}X_{-\frac{3}{2}} + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{2,-2}X_{\frac{3}{2}}, \\ \Psi'_{-\frac{3}{2}} &= R_0(r)Y_{00}X_{-\frac{3}{2}} + \frac{1}{\sqrt{5}}R_2(r)Y_{20}X_{-\frac{3}{2}} \\ &\quad - \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{2,-1}X_{-\frac{1}{2}} + \sqrt{\frac{2}{5}}R_2(r)Y_{2,-2}X_{\frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

где Y_{lm} — сферические функции, отвечающие орбитальному моменту l и его проекции m .

Огибающие $R_0(r)$ и $R_2(r)$ для Mn рассчитаны в работе [68]. Для этого в [68] использовался гамилтониан Латтинжера, в котором к кулоновскому потенциалу феноменологически добавлен короткодействующий потенциал центральной ячейки

$$V(r) = -\frac{q^2}{\epsilon r} - V_0 \exp\left[-\left(\frac{r}{r_0}\right)^2\right]. \quad (59)$$

Параметры этого потенциала V_0 и r_0 подбирались так, чтобы рассчитанная исходная энергия связи E_{Mn} совпадала с экспериментальной величиной, под которой понималась энергия ионизации акцептора Mn (112.4 meV) за вычетом энергии обменного взаимодействия. Величина последней была оценена из значения константы обменного взаимодействия $|A| = 5$ meV. На рис. 29 представлены зависимости функций

$$f(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_0(r) \text{ и } g(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}R_2(r)$$

от расстояния до центра. Как показали вычисления, при вариации r_0 в разумных пределах 2.59–3.45 Å величины $f(r)$ и $g(r)$, соответствующие исходной энергии связи, меняются относительно слабо и мало отличаются от величин, полученных в случае, если предполагать, что форма потенциала центральной ячейки описывается прямоугольной ямой.

Как видно из рис. 29, существенное падение волновой функции локализованной дырки происходит уже при расстояниях до центра порядка 1 nm, в то время как для обычного мелкого акцептора в GaAs подобное

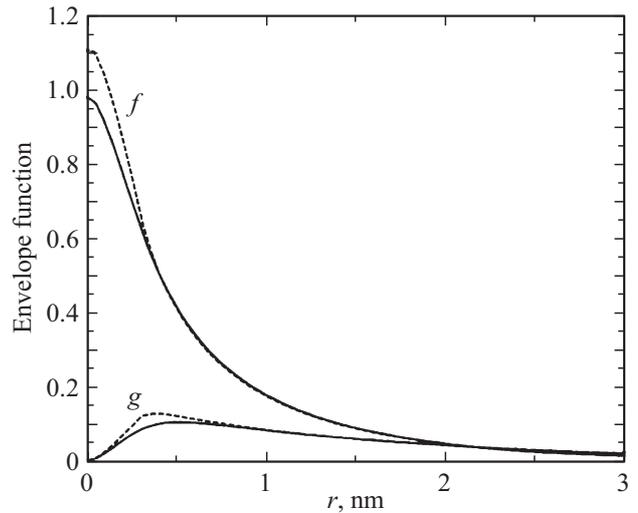


Рис. 29. Функции $f(r)$ и $g(r)$ (в единицах $\text{nm}^{-3/2}$) [[68]. Сплошные (пунктирные) кривые соответствуют гауссову (прямоугольному) потенциалу центральной ячейки при $r_0 = 2.8(2.8)$ Å и $V_0 = 2.668(2.508)$ eV.

уменьшение волновой функции дырки происходит при $r \approx 3-4$ nm. Это означает, что обменное взаимодействие, определяемое квадратом волновой функции дырки при $r = 0$, в Mn_{Ga}^0 должно быть больше, чем для мелкого парамагнитного акцептора.

Полученные в [68] значения $f(0)$ позволили, исходя из принятой величины A , оценить величину параметра, определяющего обменное взаимодействие свободных дырок с парамагнитным ионом Mn [69–72]. Эта величина оказалась равной — 0.9 eV, что находится в хорошем согласии с результатами расчетов [70–72].

12. Заключение

Таким образом модель изолированного нейтрального акцептора Mn с энергией связи основного состояния ~ 0.11 eV, предполагающая антиферромагнитное обменное взаимодействие между связанной дыркой, локализованной в состоянии Γ_8 , и пятью d -электронами иона Mn, хорошо описывает большинство экспериментальных результатов, полученных при исследованиях относительно слаболегированных образцов GaAs:Mn.¹ При этом величина константы обменного взаимодействия лежит в диапазоне 3–5 meV. В этой модели вследствие обменного взаимодействия основное состояние нейтрального акцептора соответствует полному моменту 1, g -фактор этого состояния отличается от g -фактора дырки, локализованной на мелком акцепторе и равен 2.77–2.81, а

¹ Влияние нейтральных акцепторов Mn на эффект Фарадея вблизи края основной полосы поглощения GaAs, наблюдавшееся в работе [13], как показано в [74] при низких температурах может быть вызвано смешиванием состояний свободных дырок и дырок, связанных на Mn_{Ga}^0 обменным взаимодействием. При комнатной температуре сдвиг спектра эффекта Фарадея в p -GaAs:Mn обусловлен просто уменьшением запрещенной зоны, связанным с увеличением концентрации свободных дырок [74].

расщепления энергий этого состояния в электрическом поле или при одноосных деформациях уменьшаются приблизительно в 7 раз по сравнению с величинами расщеплений для подобного акцептора в отсутствие обменного взаимодействия. Однако несмотря на последнее обстоятельство такое расщепление под влиянием существующих в кристалле случайных электрических или деформационных полей необходимо учитывать при анализе результатов некоторых экспериментов.

Кроме возбужденных состояний нейтрального акцептора, связанных с обменным взаимодействием, энергия которых не сильно отличается от энергии основного состояния, существуют и состояния, подобные возбужденным состояниям мелкого акцептора, энергия которых близка к энергии потолка валентной зоны. Обменное взаимодействие дырки, находящейся в этих состояниях с d -электронами отсутствует вследствие того, что волновая функция дырки в этом состоянии на центре имеет малую величину.

Следует также отметить, что существование относительно слабо локализованной дырки, связываемой на нейтральном акцепторе Mn, способствует образованию примесной зоны делокализованных состояний при увеличении концентрации Mn. Это обстоятельство, а также сильное обменное взаимодействие дырки со спином d -электронов может приводить к эффективному взаимодействию спинов ионов Mn и возникновению в системе их ферромагнитного упорядочения. Такое упорядочение при концентрации Mn $\sim 5\%$ наблюдалось в работе [73] и объяснялось на основе описанной выше модели изолированного акцептора Mn [5,73].

Вместе с тем некоторые экспериментальные данные не находят объяснения в указанной простой модели и требуют ее дальнейшего уточнения. В частности, недостаточно понятна причина заметного уменьшения по сравнению с ожидаемой величины магнитной восприимчивости образцов GaAs:Mn при высоких температурах. Неясно происхождение уровня, лежащего на ~ 3 meV, выше основного состояния, который обнаруживается при исследованиях поглощения ультразвука [36] и ширины линии ЭПР [57].

Авторы благодарят Н.А. Романова, В.Ф. Сапегу и К.Ф. Штельмаха за плодотворные и полезные обсуждения.

Приложение 1. Волновые функции $|F, m_F\rangle$ состояний Mn_{Ga}^0 с $F = 1, 2, 3, 4$ и различными проекциями полного момента m_F в сферическом приближении

$$|1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|1, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{20}} \left\{ -\sqrt{10} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{6} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} - \sqrt{3} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{20}} \left\{ \sqrt{10} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \sqrt{6} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \sqrt{3} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|2, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} - \frac{1}{\sqrt{6}} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \frac{1}{\sqrt{6}} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{6\sqrt{14}} \left\{ 3\sqrt{20} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{12} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} - 5\sqrt{6} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + 9\sqrt{2} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{6\sqrt{14}} \left\{ 3\sqrt{20} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \sqrt{12} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} - 5\sqrt{6} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} + 9\sqrt{2} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|2, -2\rangle = \frac{1}{\sqrt{21}} \left\{ \sqrt{3} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \sqrt{8} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \sqrt{10} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|2, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{21}} \left\{ \sqrt{3} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} - \sqrt{8} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} + \sqrt{10} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|3, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}} \left\{ \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{2}} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} - \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|3, -1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{5}} \left\{ -\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} - \frac{7}{\sqrt{6}} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} + \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + 3\Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|3, 1\rangle = \frac{1}{2\sqrt{5}} \left\{ \frac{\sqrt{5}}{\sqrt{2}} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \frac{7}{\sqrt{6}} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{\sqrt{3}} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} - 3\Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} \right\},$$

$$|3, -2\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \left\{ \sqrt{6} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} - \sqrt{5} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|3, 2\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} \left\{ -\sqrt{6} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} + \sqrt{5} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|3, -3\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \left\{ \sqrt{3} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} - \sqrt{5} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right\},$$

$$|3, 3\rangle = \frac{1}{\sqrt{8}} \left\{ -\sqrt{3} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{5} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\},$$

$$\begin{aligned}
|4, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{14}} \left\{ \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{6} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{6} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\}, \\
|4, -1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{14}} \left\{ \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{15} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{30} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \sqrt{10} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} \right\}, \\
|4, 1\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{14}} \left\{ \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \sqrt{15} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} + \sqrt{30} \Psi_{\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{10} \Psi_{-\frac{1}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} \right\}, \\
|4, -2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{7}} \left\{ \sqrt{10} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \sqrt{15} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right. \\
&\quad \left. + \sqrt{3} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\}, \\
|4, 2\rangle &= \frac{1}{2\sqrt{7}} \left\{ \sqrt{10} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{15} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} + \sqrt{3} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right\}, \\
|4, -3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left\{ \sqrt{5} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}} + \sqrt{3} \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{1}{2}} \right\}, \\
|4, 3\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} \left\{ \sqrt{5} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}} + \sqrt{3} \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{1}{2}} \right\}, \\
|4, -4\rangle &= \Psi_{-\frac{3}{2}}^S \Psi'_{-\frac{3}{2}}, \\
|4, 4\rangle &= \Psi_{\frac{3}{2}}^S \Psi'_{\frac{3}{2}}.
\end{aligned}$$

Здесь Ψ'_l — волновая функция дырки в исходном Γ_8 — состоянии с моментом $J = 3/2$ и проекцией момента l , Ψ_m^S — волновая функция $3d^5$ -электронов со спином $S = 5/2$ и проекцией спина m .

Приложение 2. Спектр и волновые функции основного состояния нейтрального центра Mn_{Ga}^0 с учетом случайных полей в кристалле

1) Корни характеристического уравнения (33) и коэффициенты $C_{1,1}^i$, $C_{1,0}^i$ и $C_{1,-1}^i$, определяющие волновые функции (49)

$$\lambda_i = 2\sqrt{\frac{12+y^2}{3}} \cos \frac{(\varphi + 2\pi i)}{3}, \quad i = 1, 2, 3;$$

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

где $y = \beta\mu_0 g_1 H / \delta_1$, $t = \cos \theta$.

При $|y| \gg 1$, разлагая выражение для λ_i в ряд по степеням y с точностью до y^{-1} , получим

$$\lambda_1 = y + (3t^2 - 1) + \frac{6}{y} - \frac{3}{2y} (3t^2 - 1)^2,$$

$$\lambda_2 = 2(1 - 3t^2),$$

$$\lambda_3 = -y + (3t^2 - 1) - \frac{6}{y} + \frac{3}{2y} (3t^2 - 1)^2.$$

Переходы $\lambda_2 \rightarrow \lambda_1$ и $\lambda_3 \rightarrow \lambda_2$ соответствуют „разрешенным“, а $\lambda_3 \rightarrow \lambda_1$ — „запрещенным“.

Коэффициенты $C_{1,1}^i$, $C_{1,0}^i$ и $C_{1,-1}^i$ ($i = 1, 2, 3$) определяются из уравнений:

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

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

2) Циркулярная поляризация фотолуминесценции, вызванной рекомбинацией горячих электронов с дырками на центрах Mn_{Ga}^0 в условиях одновременного действия постоянного магнитного поля и случайного поля в кристалле.

Степень циркулярной поляризации определяется соотношением (42). При низких температурах ($kT \ll |A|$), если расщепление в случайных полях по абсолютной величине меньше $|A|$

$$I_+ - I_- = 51(a_1 - a_2) - \frac{98}{3}(a_1 + a_2)$$

$$+ 14(a_3 + a_4)(2s + \beta) + 15(a_3 - a_4),$$

$$I_+ + I_- = 59(a_1 + a_2) + 39(a_3 + a_4)$$

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

Здесь

$$a_j = \sum_{i=1}^3 2 \int_0^1 B_j^i \frac{\exp(-\lambda_i \frac{\delta_1}{6kT})}{\sum_{i=1}^3 \exp(-\lambda_i \frac{\delta_1}{6kT})} dt,$$

где

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

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

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

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

Список литературы

- [1] Э.М. Омеляновский, В.И. Фистуль. Примеси переходных металлов в полупроводниках. Металлургия, М. (1983). 192 с.
- [2] В.Ф. Мастеров. ФТП **18**, 3 (1984).
- [3] В.И. Фистуль. Атомы легирующих примесей в полупроводниках. Физматлит, М. (2004). 431 с.
- [4] D.D. Awschalom, M.E. Flatté. Nature Phys. **3**, 153 (2007).

- [5] T. Dietl, H. Ohno. *Rev. Mod. Phys.* **86**, 197 (2014).
- [6] G.W. Ludwig, N.H. Woodbury. *Phys. Rev. Lett.* **5**, 98 (1960).
- [7] А.Б. Ройцин, Л.А. Фирштейн. *ЖТЭХ II*, 747 (1966).
- [8] U. Kaufmann, J. Schneider. *Festkörperprobleme (Adv. Solid State Phys.)* / Ed. J. Trensche. Vieweg, Braunschweig (1980). V. 20. P. 87.
- [9] И.Я. Карлик, И.А. Меркулов, Д.И. Мирлин, Л.П. Никитин, В.И. Перель, В.Ф. Сапега. *ФТТ* **24**, 3550 (1982).
- [10] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, Н.М. Колчанова, М.А. Решиков. *ФТП* **18**, 97 (1984).
- [11] L. Montelius, S. Nilsson, L.Samuelson, E. Janzen, M. Ahlstrom. *J. Appl. Phys.* **64**, 1564 (1988).
- [12] Д.Г. Андрианов, Ю.Н. Большева, Г.В. Лазарева, А.С. Савельев, С.М. Якубеня. *ФТП* **17**, 810 (1983).
- [13] A.M. Hennel, A. Twardowski, M. Godlewski. *Acta Phys. Polon. A* **67**, 313 (1985).
- [14] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, М.А. Решиков. *ФТП* **21**, 1847 (1987).
- [15] J. Schneider, U. Kaufmann, W. Wilkening, M. Baemler, F. Kohl. *Phys. Rev. Lett.* **59**, 240 (1987).
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*. Физматгиз, М. (1963). 702 с.
- [17] V.F. Sapega, M. Mureno, M. Ramsteiner, L. Daweritz, K. Ploog. *Phys. Rev. B* **66**, 075217 (2002).
- [18] T. Jungwirth, K.I. Wang, J. Masek, K.W. Edmonds, J. Konig, J. Sinova, N.A. Goncharuk, A.H. MacDonald, M. Sawicki, A. W. Rushforth, R.P. Champion, L.X. Zhao, C.T. Foxon, B.L. Gallagher. *Phys. Rev. B* **72**, 165204 (2005).
- [19] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, М.А. Решиков. *ФТТ* **30**, 765 (1988).
- [20] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, Е.Б. Осипов, М.А. Решиков. *Модель глубокого центра Mn_{Ga} в $GaAs$* . Препринт 1201. ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Л. (1988). 35 с.
- [21] W. Schairer, M. Schmidt. *Phys. Rev. B* **10**, 2501 (1974).
- [22] R.N. Bhargava, M.I. Nathan, *Phys. Rev.* **161**, 695 (1967).
- [23] Бир Г.Л., Пикус Г.Е. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*. Наука, М. (1972). 640 с.
- [24] G.L. Bir, E.I. Butikov, G.E. Pikus. *J. Phys. Chem. Solid* **24**, 1467 (1963).
- [25] J. Feinleib, S. Groves, W. Paul, R. Zallen. *Phys. Rev.* **131**, 2070 (1963).
- [26] A.M. Hennel, C.D. Brandt, Y.-T. Wu, T. Bryskiewicz, K.Y. Ko, J. Lagowski, H.C. Gatos. *Phys. Rev. B* **33**, 7353 (1986).
- [27] R.A. Chapman, W.G. Hutchinson. *Phys. Rev. Lett.* **18**, 443 (1967).
- [28] M. Linnarsson, E. Jansen, B. Monemar, M. Kleverman, A. Thilderkvist. *Phys. Rev. B* **55**, 6938 (1997).
- [29] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика*. Наука, М. (1964). С. 567.
- [30] Р.И. Джиоев, Б.П. Захарченя, В.Г. Флейшер. *Письма в ЖЭТФ* **17**, 244 (1973).
- [31] Th. Fray, M. Maier, J. Schneider, M. Gehrke. *J. Phys. C* **21**, 5539 (1988).
- [32] V.F. Sapega, T. Ruf, M. Cardona. *Phys. Status Solidi B* **226**, 339 (2001).
- [33] I.V. Krainov, J. Debus, N.S. Averkiev, G.S. Dmitriev, V.F. Sapega, E. Lahderanta. *Phys. Rev. B* **93**, 235202 (2016).
- [34] N. Almeleh, B. Goldstein. *Phys. Rev.* **128**, 1568 (1962).
- [35] R. Bleekrode, J. Dieleman, H.J. Vegter. *Phys. Lett.* **2**, 355 (1962).
- [36] K. Lassmann, H. Schad. *Solid State Commun.* **18**, 449 (1976).
- [37] Д.Г. Андрианов, Ю.А. Григорьев, С.О. Климонский, А.С. Савельев, С.М. Якубеня. *ФТП* **18**, 262 (1984).
- [38] В.Ф. Мастеров, С.Б. Михрин, Б.Е. Саморуков, К.Ф. Штельмах. *ФТП* **17**, 1259 (1983).
- [39] В.Ф. Мастеров, К.Д. Штельмах, М.Н. Барбашев. *ФТП* **22**, 654 (1988).
- [40] Н.П. Баран, В.Я. Братусь, В.М. Максименко, А.В. Марков. *Письма в ЖЭТФ* **55**, 108 (1992).
- [41] Э.И. Рашба, В.И. Шека. *ФТТ* **6**, 576 (1964).
- [42] M.V. Durnev, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko. *Phys. Rev. B* **89**, 075430 (2014).
- [43] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, О.Г. Красикова, Е.Б. Осипов, М.А. Решиков. *ФТП* **23**, 73 (1989).
- [44] К.Ф. Штельмах, М.П. Коробков, И.Г. Озеров. *ФТП* **37**, 913 (2003).
- [45] A.K. Bhattacharjee, S.Rodrigues. *Phys. Rev. B* **6**, 3836 (1972).
- [46] Н.С. Аверкиев, В.М. Аснин, Ю.Н. Ломасов, Г.Е. Пикус, А.А. Рогачев, Н.А. Рудь. *ФТТ* **23**, 3117 (1981).
- [47] W.O.G. Schmitt, E. Bangert, G. Landwehr. *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 6789 (1991).
- [48] R. Atzmuller, M. Dahl, J. Kraus, G. Schaak, J. Schubert. *J. Phys.: Condens. Matter* **3**, 6775 (1991).
- [49] В.Д. Дымников, М.И. Дьяконов, В.И. Перель. *ЖЭТФ* **71**, 2373 (1976).
- [50] Д.Г. Поляков. *ФТТ* **24**, 3542 (1982).
- [51] Б.П. Захарченя, Д.Н. Мирлин, В.И. Перель, И.И. Решина. *УФН* **136**, 458 (1982).
- [52] J. Jackle. *Z. Phys.* **257**, 212 (1972).
- [53] N.S. Averkiev, A.A. Gutkin, O.G. Krasikova, E.B. Osipov, M.A. Reshchikov. *Solid State Commun.* **68**, 1025 (1988).
- [54] K. Suzuki, N. Mikoshiba. *Phys. Rev. Lett.* **28**, 96 (1972).
- [55] K.N. Shrivastava. *Phys. Status Solidi B* **117**, 437 (1983).
- [56] А. Абрагам, Б. Блинни. *Электронный парамагнитный резонанс переходных ионов*. Мир, М. (1972). Т. 1. 651 с.
- [57] В.Ф. Мастеров, К.Ф. Штельмах, В.П. Маслов, С.Б. Михрин, Б.Е. Саморуков. *ФТП* **37**, 943 (2003).
- [58] В.Л. Бонч-Бруевич, С.Г. Калашников. *Физика полупроводников*. Мир, М. (1977). 678 с.
- [59] W.J. Brown, Jr., J.S. Blakemore. *J. Appl. Phys.* **43**, 2242 (1972).
- [60] W.J. Brown, Jr., D.A. Woodbury, J.S. Blakemore. *Phys. Rev. B* **8**, 5664 (1973).
- [61] J.S. Blakemore, W.J. Brown, Jr., M.L. Stress, D.A. Woodbury. *J. Appl. Phys.* **44**, 3352 (1973).
- [62] L.J. Vieland. *J. Appl. Phys.* **33**, 2007 (1962).
- [63] А.А. Гуткин, Н.М. Колчанова, Т.С. Лагунова, А.Е. Плотицын, М.А. Решиков, Б.Е. Саморуков. *ФТП* **22**, 1387 (1988).
- [64] В.А. Лагунов. В кн.: *Алгоритмы и математическое обеспечение для физических задач*. Л. (1978). С. 14; В.А. Лагунов, В.И. Полозенко. *Завод. лаб.* **43**, 8, 947 (1977).
- [65] К. Зеегер. *Физика полупроводников*. Мир, М. (1977). 616 с.
- [66] Ф.Д. Блатт. *Теория подвижности электронов в твердых телах*. Физматгиз, М.-Л. (1963). 224 с.
- [67] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. *ФТП* **5**, 2191 (1971).
- [68] A.K. Bhattacharjee, C. Benoit a la Guillaume. *Solid State Commun.* **113**, 17 (2000).
- [69] J.A. Gaj, R. Planel, G. Fishman. *Solid State Commun.* **29**, 435 (1979).
- [70] A.K. Bhattacharjee, G. Fishman, B. Coqblin. *Physica B* **117/118**, 449 (1983).
- [71] A.K. Bhattacharjee. *Phys. Rev. B* **46**, 5266 (1992).
- [72] T. Mizokawa, A. Fujimori. *Phys. Rev. B* **48**, 14150 (1993).
- [73] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, Y. Sugawara. *Phys. Rev. B* **57**, R2037 (1998).
- [74] Н.С. Аверкиев, А.А. Гуткин, О.Г. Максимова, Е.Б. Осипов. *ФТП* **24**, 1632 (1990).

Редактор Ю.Э. Кутяев